1479

# THESE

présentée

## A L'UNIVERSITE PARIS-SUD
## CENTRE D'ORSAY

pour obtenir

## LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

par

M. Albert LUMBROSO

**EXTENSION DE LA METHODE DE LA COORDONNEE GENERATRICE AU TRAITEMENT DES PROBLEMES DU SPECTRE CONTINU**

**Soutenue le 23 Mai 1975 devant la Commission d'Examen**

**Président** : M. R. ARVIEU

**Examinateurs** :
- Mme P. BENOIST-GUEUTAL
- MM. S. FENEUILLE
- B. GIRAUD
- J.C. HOCQUENGHEM
- D. VAUTHERIN
- J. YOCCOZ

# THESE

présentée

## A L'UNIVERSITE PARIS-SUD
## CENTRE D'ORSAY

pour obtenir

## LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

par

M. Albert LUMBROSO

**EXTENSION DE LA METHODE DE LA COORDONNEE GENERATRICE AU TRAITEMENT DES PROBLEMES DU SPECTRE CONTINU**

**Soutenue le** 23 Mai 1975 **devant la Commission d'Examen**

**Président** : M. R. ARVIEU

**Examinateurs :**
Mme P. BENOIST-GUEUTAL
MM. S. FENEUILLE
B. GIRAUD
J.C. HOCQUENGHEM
D. VAUTHERIN
J. YOCCOZ

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

REMERCIEMENTS

Je tiens à rappeler la mémoire de M. *Claude BLOCH* qui dirigeait le Service de Physique Théorique à mon arrivée à Saclay. L'atmosphère stimulante qu'il y avait créée m'a permis de commencer mes premier travaux dans d'excellentes conditions.

Ces premiers travaux ont été effectués sous la direction de M. *Vincent GILLET*. Les conseils et les critiques qu'il a bien voulu me faire tout au long de ces années, m'ont constamment guidé. Qu'il trouve ici tous mes remerciements.

Je remercie M. *Cyrano de DOMINICIS*, Chef du Service de Physique Théorique pour les facilités qu'il m'a offertes pendant la préparation de cette thèse.

Je remercie M. le Professeur *Robert ARVIEU* d'avoir accepté la présidence du Jury.

Madame le Professeur *Pierrette BENOIST-GUEUTAL* a patronné cette thèse. Je la remercie d'avoir également accepté de faire partie du Jury.

Je remercie vivement M. le Professeur *Jean YOCCOZ* d'avoir accepté de faire partie du Jury.

Je ne saurais oublier de remercier MM. *Bertrand GIRAUD* et *Jean-Claude HOCQUENGHEM*. A M. *Bertrand GIRAUD*, je dois le sujet de ce travail et de nombreuses discussions. M. *Jean-Claude HOCQUENGHEM*, mon Directeur de Recherches, m'a constamment guidé par ses critiques et éclairé par ses explications.

Je remercie MM. *Serge FENEUILLE* et *Dominique VAUTHERIN* d'avoir accepté de faire partie du Jury. Je remercie Monsieur *Dominique VAUTHERIN* pour une lecture critique du manuscrit.

Je remercie tous les membres du Service de Physique Théorique avec qui j'ai eu l'occasion d'avoir d'utiles et fructueuses discussions notamment : MM. *R. BALIAN*, *P. BONCHE*, *M. CHEMTOB*, *J.M. NORMAND* et *T. YUKAWA*, sans oublier les membres d'autres laboratoires notamment : MM. *D. BRINK*, *E. CAURIER*, *J. Le TOURNEUX*, *L. MAXIMON* et *C. MAHAUX*.

Les calculs de programmation ont bénéficié de la compétence de Mmes *C. CHEVEREAU*, *N. TICHIT* et *C. VERNEYRE*; qu'elles soient remerciées ici.

La présentation matérielle de la thèse ainsi que celle des articles est due à Mme *M. PORNEUF*, la dactylographie est due à Mme *D. LECHATON*. Je les remercie ici.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548106_0027

# RESUMÉ

Dans les méthodes collectives, on traite le comportement de N nucléons, à l'aide d'une fonction d'onde à N corps . On opère sur cette fonction d'onde des transformations de façon à mettre en évidence le degré de liberté que l'on veut étudier. Cependant, il existe deux difficultés dans cette approche. D'une part la correspondance entre les variables initiales et les variables finales n'est pas simple, et, d'autre part, on ne sait pas comment antisymétriser la fonction d'onde dans les nouvelles variables. Dans la méthode de la coordonnée génératrice, pour éviter ces deux difficultés essentielles, on conserve les coordonnées initiales des nucléons et on introduit un paramètre supplémentaire $\alpha$, la coordonnée génératrice, pour décrire le mouvement collectif considéré. Une fois choisie une base, on écrit la fonction d'onde d'essai, comme une combinaison linéaire de tous les vecteurs de base sur une amplitude de mélange $f(\alpha)$, que l'on sait relier à la fonction d'onde relative du système. Ce type de méthode a surtout été utilisé pour les calculs d'états liés, et ce travail est une extension de la méthode aux problèmes de diffusion. Cependant, si les propriétés singulières de $f(\alpha)$ ne sont pas très gênantes dans les problèmes d'états liés à cause de la décroissance exponentielle de la fonction d'onde relative, dans les problèmes de diffusion, la solution relative décroît beaucoup plus lentement et nécessite des méthodes de résolution beaucoup plus élaborées.

L'objet de ce travail consiste à étendre les solutions de l'équation de Hill et Wheeler aux problèmes de diffusion. En effet la relation entre la fonction d'onde relative et l'amplitude de Hill et Wheeler est une opération de convolution. On constate, sur leur transformée de Fourier, que le noyau de recouvrement et le noyau hamiltonien sont suffisamment convergents en représentation impulsion pour compenser les divergences de l'amplitude de Hill et Wheeler. En outre, le noyau de recouvrement et le noyau d'énergie cinétique se scindent en deux parties. Une partie locale correspondant aux termes directs de l'antisymétrisation, et une autre partie (liée aux termes d'échange), non locale et de courte portée. Dans cette procédure, on ramène l'équation de Hill et Wheeler à une équation de Schrodinger dans l'espace des impulsions. Signalons que cette méthode est une méthode de type indirect, contrairement aux méthodes de type direct qui sont basées

sur le principe suivant. On scinde l'intégrale de Hill et Wheeler en deux parties, une partie interne et une partie externe, on discrétise la partie interne de l'intégrale et dans la partie externe, on remplace l'amplitude inconnue par la fonction d'onde asymptotique. Ces méthodes directes conduisent également à des résultats, pour les basses énergies, qui sont en accord avec nos calculs.

Nous appliquons la méthode indirecte au calcul des déphasages pour la diffusion élastique d'une particule $\alpha$ . Ces particules sont considérées comme sphériques, et ne se déforment pas au cours de la collision. Les termes d'énergie cinétique et d'énergie potentielle sont calculés en tenant compte exactement du principe de Pauli. Pour l'interaction coulombienne, dans laquelle nous introduisons un rayon de coupure, une approximation est nécessaire. En effet des difficultés de calculs analytiques ne nous permettent que de tenir compte des processus d'échange total ou sans échange entre les particules en diffusion. Cette approximation peut être justifiée si l'on considère la stabilité des particules, et par conséquent si l'on admet que les processus avec échange d'un ou de deux nucléons entre les particules $\alpha$ sont moins probables que ceux d'échange total ou sans échange.

Les résultats sont comparés aux résultats expérimentaux. A l'aide d'une force nucléaire phénoménologique (force de Volkov) on peut reproduire les valeurs expérimentales jusqu'à des énergies relativement élevées (50 MeV dans le centre de masse) alors qu'à des valeurs bien plus basses, les voies inélastiques sont ouvertes. Ces résultats sont confirmés pour des plus basses énergies par des calculs effectués par des méthodes de résolution directe .

En conclusion, la méthode de la coordonnée génératrice a surtout été utilisée pour l'étude des rotations ainsi que pour l'étude des formes et des mouvements collectifs nucléaires. Le présent travail avait pour but de montrer que ce formalisme permet un traitement rigoureusement microscopique des collisions nucléaires. En effet le problème de la collision élastique de deux noyaux est ramené à un problème de diffusion d'une particule par un potentiel non local et dépendant de l'énergie dans lequel apparaît explicitement le rôle joué par le principe de Pauli. L'avantage de ce formalisme étant de permettre, par rapport au formalisme du groupe résonnant, l'usage de la seconde quantification. Les principaux inconvénients résident dans le fait que les noyaux sont incompressibles et que l'on ne tient compte que d'une seule voie dans la réaction.

# P L A N

INTRODUCTION

CHAPITRE I.- L'équation de Hill et Wheeler

I.- Forme générale de l'équation de Hill et Wheeler

II.- Propriétés de l'équation de Hill et Wheeler

a) Représentations équivalentes

b) Unitarité de la correspondance

c) Hamiltonien équivalent

III.- Approximation du recouvrement gaussien

a) Le recouvrement gaussien et l'approximation quadratique

b) Justification du recouvrement gaussien et de l'approximation quadratique.

CHAPITRE II.- Résolution de l'équation de Hill et Wheeler

I.- Etat du problème

II.- Résolution de l'équation dans les cas discrets

III.- Résolution de l'équation dans les cas continus.

CHAPITRE III.- Méthode de la coordonnée génératrice pour les réactions nucléaires

I.- Choix de l'espace variationnel

1) Introduction

2) Invariance par translation

3) Cas de l'oscillateur harmonique

4) Calcul des noyaux

II.- Solution de l'équation de Hill et Wheeler

1) Solution en représentation d'impulsion

2) Solution en représentation des coordonnées

a) Méthode de Tacaksy

b) Seconde méthode

c) Méthode de Yukawa

CHAPITRE IV.- Traitement d'un cas réaliste : Diffusion élastique de particules α

I.- Introduction

II.- Propriétés de l'amplitude de Hill et Wheeler

III.- Solutions du système

IV.- Traitement du potentiel coulombien

RESULTATS

CONCLUSIONS

REFERENCES

FIGURES

Appendice A : α-α scattering in the generator coordinate formalism

Appendice B : An application of the generator coordinate formalism : α-α scattering

Appendice C : Generator Coordinate method for scattering : an exact solution

Appendice D : Coordonnée Génératrice dans les états du continu.

# INTRODUCTION

Pour décrire les mouvements collectifs nucléaires il existe deux classes de modèles, les modèles microscopiques et les modèles phénoménologiques

Les modèles microscopiques cherchent à obtenir les propriétés nucléaires à partir d'un hamiltonien à N-corps. C'est le cas, par exemple, de la RPA où l'on décrit les mouvements collectifs en termes d'excitation particule-trou. En faisant l'hypothèse de la RPA et à partir d'une force nucléon-nucléon, on peut calculer les propriétés vibrationnelles des états excités. On est cependant souvent conduit à diagonaliser des matrices de grandes dimensions ce qui ne donne pas une image simple du mouvement collectif.

Les modèles phénoménologiques, comme le modèle de Bohr et Mottelson, sont plus simples à utiliser mais ne permettent pas de calculer d'une façon consistente les paramètres d'inertie du problème à partir de grands principes.

Pour essayer d'unifier ces deux approches, certains essais ont été entrepris en introduisant les coordonnées collectives. Celles-ci sont definies en fonction des coordonnées de particules individuelles et commutent avec des coordonnées résiduelles dites "intrinsèques".

En effet dans les méthodes collectives on traite le comportement de N nucléons de coordonnées spatiales, de spin et d'isospin $x_1 \ldots x_N$ à l'aide de la fonction d'onde $\psi(x_1 \ldots x_N)$ sur laquelle on essaie d'opérer des transformations de façon à mettre en évidence les degrés de liberté que l'on se propose de décrire. La fonction $\psi(x_1 \ldots x_N)$ est solution de l'équation de Schrodinger

$$H\,\Psi(x_1 \cdots x_N) = E\,\Psi(x_1 \cdots x_N)$$

Le programme est alors le suivant : si on appelle $U_n$ le degré de liberté à n dimensions que l'on veut décrire, on cherche une expression de $\psi(x_1 \ldots x_N)$ en $\psi(U_n, \xi_1 \ldots \xi_{N-n})$ avec $\xi_1 \ldots \xi_{N-n}$, N-n variables complémentaires et l'équation de Schrodinger précédente devient une équation de Schrodinger dans les nouvelles variables soit :

$$\Psi(x_1 \cdots x_N) \Longrightarrow \quad \Psi(U_n, \xi_1 \cdots \xi_{N-n})$$

$$H(x_1 \cdots x_N) \Longrightarrow \mathcal{H}(U_n, \xi_1 \cdots \xi_{N-n})$$

On peut en outre faire l'hypothèse que la fonction d'onde $\psi$ s'exprime sous la forme du produit de deux fonctions d'onde, l'une $\Phi(U_n)$ associée au mouvement collectif considéré et l'autre $\varphi_{int}(\xi_1 \cdots \xi_{N-n})$ fonction des variables internes, et poser alors

$$\Psi(U_n, \xi_1 \cdots \xi_{N-n}) = \phi(U_n)\, \varphi_{int}(\xi_1 \cdots \xi_{N-n})$$

Il est nécessaire d'écrire le hamiltonien en fonction de la variable collective ce qui revient à sommer sur les variables internes

$$h(U) = \int d\xi_1 \cdots d\xi_{N-n}\, \mathcal{H}(U, \xi_1 \cdots \xi_{N-n}) \left|\varphi_{int}(\xi_1 \cdots \xi_{N-n})\right|^2$$

Mais ce programme est difficile à appliquer car d'une part il n'existe pas de relation simple entre les $\{\xi\}$ et les $\{x\}$ et d'autre part il n'est pas simple non plus de conserver l'antisymétrisation dans les nouvelles variables.

Pour éviter ces difficultés essentielles, Wheeler a proposé de conserver les coordonnées individuelles des nucléons et de traiter chaque degré de liberté collectif à l'aide d'un <u>paramètre</u> supplémentaire qui ne s'exprime pas en fonction des coordonnées individuelles.

On se donne alors une base $\Phi_{\vec{r}}(\vec{x})$ dépendant d'un paramètre $\vec{r}$ et on engendre la fonction d'onde d'essai du système en prenant la combinaison linéaire des vecteurs de base quand le paramètre prend toutes les valeurs possibles en posant

$$\psi(\vec{x}) = \int f(\vec{r})\, \phi_{\vec{r}}(x)\, d^3\vec{r}$$

L'amplitude de ce mélange de configurations est appelée amplitude de Hill-Wheeler, et elle contient toute l'information que l'on veut extraire.

En d'autres termes, les coordonnées génératrices ne sont pas des coordonnées dynamiques, mais décrivent un mouvement collectif moyen.

Dans ce travail nous avons utilisé la méthode de la coordonnée génératrice pour traiter un problème de diffusion, en nous appuyant sur une méthode de résolution des équations de Hill et Wheeler qui ramène le problème de la collision elastique de deux particules $\alpha$ à la diffusion d'une particule par un potentiel microscopique. Le premier chapitre est consacré à discuter les supports théoriques de l'équation de Hill et Wheeler. Dans le second chapitre on distingue la résolution des états liés et des états de diffusion pour mettre en lumière les difficultés liées aux problèmes de diffusion. Une discussion des différentes méthodes de résolution actuellement utilisées est faite au chapitre III. Le dernier chapitre est l'application à un cas réaliste, du formalisme de la coordonnée génératrice. Nous y verrons en particulier comment à partir d'une force nucléon-nucléon phénoménologique on obtient des déphasages dans la voie élastiques $\alpha$-$\alpha$. Enfin dans les appendices A, B, C et D sont présentés des travaux qui ont été publiés. L'appendice A, article principal de ce travail est consacré au système $\alpha$-$\alpha$. Dans les appendices C et D nous présentons un modèle schématique, le di-neutron où nous montrons une méthode de résolution pour l'équation de Hill et Wheeler. L'appendice B insiste plus spécialement sur les propriétés de distribution de l'amplitude de Hill et Wheeler.

# CHAPITRE I.

## L'EQUATION DE HILL-WHEELER

Dans ce chapitre nous allons rappeler les hypothèses qui sous-tendent la théorie de Hill et Wheeler [1] et étudier les solutions des équations dans le cadre d'une approximation soluble : l'hypothèse du recouvrement gaussien [2].

### I.- FORME GENERALE DE L'EQUATION DE HILL-WHEELER.

On suppose que le système physique considéré est décrit par un Hamiltonien à N-corps $\mathcal{H}$ et que l'on dispose d'une base de fonctions $\Phi_{\vec{\alpha}}(\vec{x})$ où $\vec{x}$ désigne l'ensemble $\vec{x}_1 \ldots \vec{x}_N$ des coordonnées des nucléons et $\vec{\alpha}$ désigne $\vec{\alpha}_1 \ldots \vec{\alpha}_M$ paramètres additionnels réels qu'on appelle les coordonnées génératrices.

A l'aide de ces fonctions on construit un état propre approché $\psi(x)$ du Hamiltonien en superposant les fonctions d'onde $\Phi_\alpha(x)$ quand l'ensemble $\alpha$ prend toutes les valeurs possibles, c'est à dire que la fonction d'onde d'essai $\psi(x)$ est une combinaison linéaire des $\Phi_\alpha(x)$ avec l'amplitude $f(\alpha)$, appelée amplitude de Hill-Wheeler,

$$\psi(\vec{x}) = \int f(\vec{\alpha})\, \Phi_{\vec{\alpha}}\, d^3\vec{\alpha} \qquad (I.1)$$

avec $d\alpha = d\alpha_1 d\alpha_2 \ldots d\alpha_M$.

Pour les problèmes d'états liés, la détermination de $f(\vec{\alpha})$ se fait par l'application d'un principe variationnel sur l'énergie.

$$\frac{\delta \langle E \rangle}{\delta \psi} = \frac{\delta}{\delta \psi} \left[ \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle \right]$$

ce qui conduit à l'équation intégrale pour $f(\vec{\alpha})$

$$\int \left\{ H(\vec{\alpha}, \vec{\alpha}') - E\, N(\vec{\alpha}, \vec{\alpha}') \right\} f(\vec{\alpha}')\, d^3\vec{\alpha}' = 0 \qquad (I.2)$$

Le noyau d'énergie est

$$H(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = \langle \phi_{\vec{\alpha}'} | \mathcal{H} | \phi_{\vec{\alpha}} \rangle \tag{1.3}$$

et le noyau de recouvrement est

$$N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = \langle \phi_{\vec{\alpha}'} | \phi_{\vec{\alpha}} \rangle \tag{1.4}$$

L'équation (1.2) est l'équation de Hill et Wheeler. Le calcul de la fonction d'onde (1.1) conduit à la résolution de l'équation (1.2) La plus basse valeur propre E sera une valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental du système, et les valeurs propres d'énergie supérieure seront associées aux états excités.

Pour les problèmes de diffusion, il est possible d'appliquer des principes variationnels sur les déphasages qui conduisent à la même équation (1.2) à résoudre [21]. On peut cependant remarquer [3] que le principe variationnel dans le cas des états liés, conduit à la diagonalisation de l'Hamiltonien $\mathcal{H}$ dans le sous espace engendré par les fonctions génératrices.

On subdivise l'espace vectoriel des fonctions d'onde du système de N-nucléons en un sous espace P et son complémentaire orthogonal Q. Suivant les notations de Feshbach [4] l'équation de Schrodinger s'écrit

$$(E - \mathcal{H}_{PP})\psi_P = \mathcal{H}_{PQ}\psi_Q$$

$$(E - \mathcal{H}_{QQ})\psi_Q = \mathcal{H}_{QP}\psi_P$$

et par élimination de $\psi_Q$ on aboutit à l'équation suivante

$$(E - \mathcal{H}'_{PP})\psi_P = 0 \tag{1.5}$$

pour l'Hamiltonien effectif

$$\mathcal{H}'_{PP} = \mathcal{H}_{PP} + \mathcal{H}_{PQ}(E + i\epsilon - \mathcal{H}_{QQ})^{-1}\mathcal{H}_{QP}.$$

Si le sous espace P est sous-tendu par un ensemble de fonctions génératrices dépendant d'un paramètre continu, l'équation (1.5) s'exprime, après

projection sur les fonctions de cet ensemble, par une équation de Hill et Wheeler, qui possède les mêmes conditions de validité que l'équation (1.5). C'est une justification possible de l'équation de Hill-Wheeler pour le traitement des états du continu. Le problème des conditions aux limites auxquelles f doit satisfaire sera examiné cas par cas.

## II.- PROPRIETES DE L'EQUATION DE HILL ET WHEELER

Dans ce paragraphe nous allons préciser la nature des éléments théoriques essentiels de la méthode de la coordonnée génératrice.

L'ensemble des états $\psi(x)$, engendrés par l'intégrale de Hill et Wheeler (1.2) sous tend un sous espace $||\mathcal{H}_\Phi||$ de l'espace de Hilbert $||\mathcal{H}||$. Il est équivalent de diagonaliser le Hamiltonien $\mathcal{H}$ dans le sous-espace $||\mathcal{H}_\Phi||$ ou de résoudre l'équation de Hill et Wheeler. La méthode de la coordonnée génératrice, conduirait à la solution exacte si le sous-espace $||\mathcal{H}_\Phi||$ représentait l'espace de Hilbert complet, c'est à dire si la base était complète. Or l'un des avantages essentiels de la GCM est de sélectionner un ensemble restreint de vecteurs de base avec lesquels on espère obtenir une bonne description du système physique. De ce fait les solutions seront des solutions approchées, et le choix de la bonne ou des bonnes coordonnées génératrices est essentiel. Pour ce choix des bonnes coordonnées génératrices, on se laisse guider par l'intuition, et l'adéquation de la coordonnée génératrice au degré de liberté que l'on cherche à décrire dépendra en définitive de la comparaison avec les résultats expérimentaux. Néanmoins une fois choisi le (ou les) paramètre(s) et la base, il reste à résoudre l'équation de Hill-Wheeler et on cherche à simplifier le problème.

### a) Représentations équivalentes.

Considérons la famille de fonctions $\chi(\vec{q},\vec{\alpha})$ dépendant des paramètres $\vec{q}_1 \ldots \vec{q}_N$ et $\vec{\alpha}_1 \ldots \vec{\alpha}_M$, et possédant la propriété

$$N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = \int \chi^*(\vec{q},\vec{\alpha})\, \chi(\vec{q},\vec{\alpha})\, d^3\vec{q} \qquad (1.6)$$

où $N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}')$ est le noyau de recouvrement défini à l'éq. (1.4). Si $f(\vec{\alpha})$ est l'amplitude qui engendre $\psi(\vec{x})$, alors la même $f(\vec{\alpha})$ engendre une fonction $g(\vec{q})$ telle que

$$g(\vec{q}) = \int \chi(\vec{q},\vec{\alpha})\, f(\vec{\alpha})\, d^3\vec{\alpha} \qquad (I.7)$$

La classe de fonctions $g(\vec{q})$ forme un sous espace $||\mathcal{H}_g||$ de $||\mathcal{H}||$ et il existe une correspondance bi-univoque entre les $g(q) \in ||\mathcal{H}_g||$ et les $\psi(x) \in ||\mathcal{H}_\Phi||$ que l'on dénote par

$$\Psi(\vec{x}) = U\, g(\vec{q}) \tag{1.8}$$

b) Unitarité de U.

i) Soient $\psi_1(\vec{x})$ et $g_1(\vec{q})$ deux fonctions engendrées par l'amplitude $f_1(\vec{\alpha})$ et soient $\psi_2(\vec{x})$ et $g_2(\vec{q})$ deux fonctions engendrées par $f_2(\vec{\beta})$

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int f_1^*(\vec{\alpha}) \langle \phi_{\vec{\alpha}} | \phi_{\vec{\beta}} \rangle f_2(\vec{\beta})\, d^3\vec{\alpha}\, d^3\vec{\beta}$$

$$= \int f_1^*(\vec{\alpha})\ N(\vec{\alpha},\vec{\beta})\ f_2(\vec{\beta})\, d^3\vec{\alpha}\, d^3\vec{\beta}$$

$$= \int f_1^*(\vec{\alpha})\ \chi^*(\vec{q},\vec{\alpha})\ \chi(\vec{q},\vec{\beta})\, d^3\vec{\alpha}\, d^3\vec{\beta}\, d^3\vec{q}$$

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle g_1 | g_2 \rangle \tag{I.9}$$

Donc U conserve le produit scalaire et on peut déduire de cette propriété précédente l'égalité :

$$\langle \Psi_1 - \Psi_2 | \Psi_1 - \Psi_2 \rangle = \langle g_1 - g_2 | g_1 - g_2 \rangle \tag{I.10}$$

ii) L'équation (1.10) peut être utilisée pour démontrer qu'il existe une correspondance unique entre les fonctions définies dans $||\mathcal{H}_\Phi||$ et les fonctions définies dans $||\mathcal{H}_g||$. En effet si $f_1(\vec{\alpha})$ et $f_2(\vec{\beta})$ engendrent la même fonction $g(\vec{q})$ on a $g_1(\vec{q}) = g_2(\vec{q}) = g(\vec{q})$ donc d'après l'éq. (1.10)

$$\langle \Psi_1 - \Psi_2 |\ \Psi_1 - \Psi_2 \rangle = 0$$

d'où

$$\Psi_1(\vec{x}) = \Psi_2(\vec{x})$$

La conservation du produit scalaire et la correspondance des fonctions dans chacun des sous espaces suffit à démontrer l'unitarité de U.

c) Hamiltonien équivalent

On peut donc chercher à résoudre les équations de Hill et Wheeler par la méthode du Hamiltonien équivalent, car la transformation U permet d'établir la correspondance entre les opérateurs agissant dans $||\mathcal{H}_g||$ et ceux agissant dans l'espace à N particules. Si $\mathcal{H}$ est le Hamiltonien complet on aura en particuler dans $||\mathcal{H}_g||$ le hamiltonien équivalent

$$\hat{h} = U^{\dagger} \mathcal{H} U \tag{1.11}$$

et la diagonalisation de $\mathcal{H}$ dans $||\mathcal{H}_\Phi||$ est équivalente à la diagonalisation de $\hat{h}$ dans $||\mathcal{H}_g||$. L'équation de Hill et Wheeler devient équivalente au problème aux valeurs propres suivant

$$\hat{h}\, g = E\, g \tag{1.12}$$

Ce résultat est utile dans la mesure où on peut associer à un hamiltonien donné un hamiltonien équivalent plus simple à résoudre. En particulier si on postule l'approximation du recouvrement gaussien [5], l'équation conduit à un système d'équations semblables à celui que l'on obtient dans les calculs de la R.P.A.

III.- APPROXIMATION DU RECOUVREMENT GAUSSIEN.

a) Le recouvrement gaussien et l'approximation quadratique

Dans ce paragraphe nous allons examiner un cas particulier où $N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}')$ et $H(\vec{\alpha},\vec{\alpha}')$ satisfont à l'approximation du recouvrement gaussien, c'est à dire

$$\text{i)} \quad N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = \exp\left[-\textstyle\sum_i (\vec{\alpha}_i - \vec{\alpha}'_i)^2\right] \tag{1.13}$$

$$\text{ii)} \quad H(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = H(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') \,/\, N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') \tag{1.14}$$

$$= E(0) + \tfrac{1}{2} \sum_{ij} \left\{ B_{ij}\, \vec{\alpha}_i \vec{\alpha}_j + B^{*}_{ij}\, \alpha'_i \alpha'_j + 2 A_{ij}\, \alpha_i \alpha'_j \right\}$$

Ce cas est utile dans la mesure où il permet de mener les calculs analytiquement. Il présente en outre l'avantage d'avoir un support réaliste. Sous cette hypothèse on démontre alors que le hamiltonien équivalent peut être obtenu en remplaçant les $\alpha$ par des opérateurs $b^{+}$ et les $\alpha'$ par des

opérateurs b, où ces opérateurs sont définis de la manière suivante à partir des paramètres $q_j$ et des moments conjugués qui leur sont associés $\pi_j$:

$$b_j = q_j + i\pi_j \; ; \quad b_j^+ = q_j - i\pi_j \; ; \quad \pi_j = -i \frac{\partial}{\partial q_j}$$

Ces opérateurs obéissent aux relations de commutation des bosons

$$\left[ b_i , b_j^+ \right] = \delta_{ij} \; ; \quad \left[ b, b \right] = \left[ b^+, b^+ \right] = 0$$

On vérifie que le Hamiltonien $\hat{h}$ ainsi construit satisfait à la relation

$$H(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = \int \chi^* (\vec{q},\vec{\alpha}) \, \hat{h} \, \chi(\vec{q},\vec{\alpha}) \, d^3\vec{q} \qquad (1.15)$$

Pour résoudre le problème aux valeurs propres (1.12) on peut soit chercher les modes normaux pour les systèmes d'oscillateurs décrits par le Hamiltonien équivalent, soit chercher une méthode en quasi-bosons. Dans ce dernier cas on introduit l'opérateur

$$Q_\rho^\dagger = \sum_i \left\{ X_{\rho i} \, b_i^\dagger - Y_{\rho i} \, b_i \right\}$$

les coefficients $X_{\rho i}$ et $Y_{\rho i}$ sont déterminés de telle sorte que

$$\left[ \hat{h} , Q_\rho^\dagger \right] = \epsilon_\rho \, Q_\rho^\dagger$$

ce qui conduit au système d'équations que l'on rencontre en approximation des quasi-bosons :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_\rho \\ Y_\rho \end{pmatrix} = \epsilon_\rho \begin{pmatrix} X_\rho \\ Y_\rho \end{pmatrix}$$

où $X_\rho (Y_\rho)$ est le vecteur colonne d'éléments $X_{\rho i} (Y_{\rho i})$ et A et B sont les matrices définies à l'équation (1.14 ).

b) Justification de l'approximation gaussienne et de l'approximation quadratique

Si les fonctions d'onde $\Phi_{\vec{\alpha}}(\vec{x})$ sont normalisées, la fonction de recouvrement $N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = 1$ pour $\vec{\alpha}_i' = \vec{\alpha}_i$. Des calculs numériques ont montré, dans des cas spéciaux que $N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}')$ décroit rapidement vers zéro quand

$\vec{\alpha}_i - \vec{\alpha}_i'$ augmente. D'un autre côté, le rapport

$$k(\vec{\alpha},\vec{\alpha}') = \frac{H(\vec{\alpha}\vec{\alpha}')}{N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}')}$$

est une fonction qui en général varie peu avec $\vec{\alpha}_i$ ou $\vec{\alpha}_i'$. On fait alors l'approximation quadratique qui consiste à limiter le développement de $k(\vec{\alpha},\vec{\alpha}')$ aux termes quadratiques. Cette approximation est analogue à l'approximation des petites vibrations en mécanique classique. L'ensemble des paramètres $\alpha_i = 0$ qui minimise $E(\vec{\alpha}) = k(\vec{\alpha},\vec{\alpha})$ correspond à un état d'équilibre, et la fonction d'onde d'essai (1.1) décrit les vibrations autour de l'équilibre. Limiter le développement de $k(\vec{\alpha},\vec{\alpha})$ à l'approximation quadratique a pour équivalent en mécanique classique le développement de l'Hamiltonien en série de puissances des coordonnées et des moments.

# CHAPITRE II

## RESOLUTION DE L'EQUATION DE HILL ET WHEELER.

### I.- ETAT DU PROBLEME

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent la résolution des équations de Hill et Wheeler est équivalente, pour les problèmes d'états liés, à une diagonalisation dans le sous espace engendré par la base $\Phi_{\vec{\alpha}}(\vec{x})$. L'existence d'un noyau de norme non orthogonal, rend nécessaire l'usage d'opérations algébriques. D'un autre côté, même si le noyau de norme est régulier, l'amplitude de Hill et Wheeler $f(\vec{\alpha})$, peut se présenter comme une distribution hautement singulière comme nous l'avons montré [6] sur le modèle schématique du di-neutron (appendices C et D).

Nous pouvons pour fixer les idées montrer sur un modèle à une dimension les divergences de l'amplitude f. En effet soit une particule sur un axe, dans un puits d'oscillateur harmonique et dont la fonction d'onde est

$$\psi(x) = \pi^{-1/4}\, b^{-1/2}\, e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

Supposons que l'on veuille traiter ce problème en coordonnée génératrice et que la fonction génératrice soit

$$\Phi_\alpha = \pi^{-1/4}\, b'^{-1/2}\, e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2b'^2}}$$

et faisons l'hypothèse $b' > b$.

Le recouvrement dans un tel système est

$$N(\alpha,\alpha') = e^{-\frac{(\alpha-\alpha')^2}{4b'^2}}$$

et l'équation de Hill et Wheeler à résoudre contiendra certainement un tel terme $N(\vec{\alpha},\vec{\alpha}')$. On peut démontrer trivialement que la solution va être singulière. On sait, en effet, que f doit vérifier

$$\Psi(x) = \int d\alpha \, f(\alpha) \, \phi_\alpha(x)$$

et donc par transformée de Fourier de ce produit de convolution on trouve

$$e^{-\frac{b^2 q^2}{2}} = C \, \tilde{f}(q) \, e^{-\frac{b'^2 q^2}{2}}$$

soit

$$f(q) = C \, e^{\frac{(b'^2 - b^2)}{2} q^2}$$

avec $b'^2 - b^2 > 0$ , C étant une constante numérique triviale. On voit donc dans ce cas simple qu'avec une telle amplitude on ne peut pas retourner à la représentation initiale par une transformation de Fourier inverse. On en conclut que f n'est pas une fonction ordinaire.

Enfin, l'intégrale de Hill et Wheeler est de bornes infinies et tout calcul numérique doit d'une manière générale remplacer ces bornes infinies par des bornes finies puis discrétiser en choisissant un réseau d'intégration adapté au problème. Il nous faut distinguer les deux cas suivants :

- cas des états liés
- cas des états de diffusion.

Dans les deux cas, l'amplitude de Hill-Wheeler est reliée à la fonction d'onde du mouvement relatif. Ce mouvement relatif décroit exponentiellement dans les cas liés et rapidement tend vers zéro ce qui justifie les procédés de discrétisation. Dans les cas de diffusion, la fonction d'onde ne décroit pas exponentiellement et le problème de la troncature de l'intégrale devient prépondérant. En effet dans les problèmes de réactions nucléaires les déphasages donnent l'information physique. Un déphasage se mesure à une certaine distance de l'origine d'où la nécessité de raccorder la solution dans la région interne à la solution dans la région externe. Ce raccordement qui est déjà une opération délicate pour les solutions régulières le sera davantage pour des solutions irrégulières comme c'est notre cas.

Un des aspects de ce travail a consisté à introduire une méthode de résolution de l'équation intégrale de Hill-Wheeler dans les cas de diffusion [6]. Nous allons décrire le principe des méthodes qui sont actuellement utilisées pour les cas discrets et pour les cas liés.

## II.- RESOLUTION DE L'EQUATION DANS LES CAS DISCRETS.

Il s'agit de résoudre l'équation (1.2) que nous écrivons ici, pour alléger l'écriture, sous forme opératorielle

$$(H - EN)\, f = 0 \qquad (II.1)$$

a) Si N est l'unité : l'équation se ramène à diagonaliser H

$$\sum_j (H_{ij} - E\,\delta_{ij})\, f_j = 0$$

et les méthodes de diagonalisation numérique de matrices sont bien connues.

b) Si N n'est pas diagonal : cet opérateur est cependant positif, et il existe une matrice M, racine carrée de N ; dans ce cas

- Si M est inversible, en multipliant à gauche par $(M^+)$ l'équation précédente devient

$$(M^{-1} H M^{-1} - E)(M f) = 0 \qquad (II.2)$$

soit aussi

$$(M^{-1} H M^{-1} - E)\, g = 0$$

avec g = Mf.

On obtiendra donc g par diagonalisation et f par $M^{-1}g$

- Si M n'est pas inversible, les vecteurs de la base oblique initiale ne sont pas linéairement indépendants. L'opérateur N a des valeurs propres nulles. Il faut dans ce cas réduire la base à une base de vecteurs linéairement indépendants, et on est ramené au problème précédent dans un espace de dimensions plus petites.

## III.- RESOLUTION DES EQUATIONS DANS LES CAS CONTINUS.

Pendant longtemps, la méthode des groupes de résonnance fut le seul formalisme dans lequel on pouvait décrire la diffusion nucléaire en termes de potentiel nucléon-nucléon tout en tenant compte correctement de l'antisymétrisation. C'est un point de vue moléculaire, suggéré par Wheeler [7], pour la description des propriétés de la structure nucléaire et des réactions.

Si un état nucléaire a tendance à se séparer en deux agrégats différents A et B, on peut le décrire au moyen de la fonction d'onde suivante

$$\Phi^{RG} = \mathcal{A}\left\{\Psi_{int}(A)\,\Psi_{int}(B)\,g(\vec{R})\right\} \qquad (II.3)$$

où $\mathcal{A}$ est l'opérateur d'antisymétrisation, $\vec{R}$ la coordonnée relative des deux centres de masse $\vec{R}_A - \vec{R}_B$ et $\psi_{int}(A)$ et $\psi_{int}(B)$ sont les fonctions d'ondes internes de fragments A et B. La fonction $\chi(\vec{R})$ décrit le mouvement relatif des deux agrégats

La fonction d'onde $g(\vec{R})$ s'obtient en diagonalisant l'hamiltonien H dans l'espace engendré par $\Phi^{RG}$ ce qui conduit à l'équation

$$\langle \Psi_{int}(A)\,\Psi_{int}(B) \,|\, H-E \,|\, \Phi^{RG} \rangle = 0$$

d'où l'équation intégrodifférentielle suivante à résoudre

$$\left(H_D - E\right) g(\vec{R}) = -\int K(\vec{R},\vec{R}')\, g(\vec{R}')\, d^3\vec{R}'$$

où $H_D$ représente la partie directe de l'hamiltonien et $K(\vec{R},\vec{R}')$ la partie due à l'antisymétrisation. Cette méthode des groupes de résonance n'a été appliquée qu'au cas des fragments légers, étant donné la complexité des calculs nécessaires à l'obtention du noyau K. On espère avec la méthode de la coordonnée génératrice pouvoir traiter des fragments plus lourds, car les éléments de matrice sont plus faciles à obtenir.

Dans les calculs de coordonnée génératrice deux types de méthodes ont été utilisées pour le calcul des déphasages :

- les méthodes indirectes qui ramènent l'équation de Hill-Wheeler à une équation de Schrodinger dans l'espace des impulsions, et conduisent aux déphasages par des méthodes en général basées sur la résolution de certaines classes d'équationsde Fredholm.

- les méthodes directes qui résolvent directement le problème dans l'espace des coordonnées au moyen de discrétisations et de troncatures ad. hoc. Ces deux points de vue sont différents. Si $\vec{r}$ est la coordonnée génératrice dans la représentation des coordonnées et $\vec{q}$ sa variable conjuguée en représentation d'impulsion, les recouvrements n'auront pas les mêmes propriétés dans les deux espaces. Pour la représentation d'impulsion, on s'aperçoit que l'on peut toujours écrire en prenant pour $\phi_{\vec{q}}$ la transformée de Fourier de $\phi_{\vec{r}}$ par rapport à $\vec{r}$ et en normalisant $\phi_{\vec{q}}$ correctement,

$$\langle \phi_{\vec{q}'} | \phi_{\vec{q}} \rangle = \delta(\vec{q}-\vec{q}') + \eta(\vec{q},\vec{q}')$$

l'opérateur $\eta(\vec{q},\vec{q}')$ qui contient les effets d'échange, est un opérateur borné dont la transformée de Fourier $\eta(\vec{r},\vec{r}')$ est de courte portée et de carré sommable. Cependant pas possible de trouver une propriété comparable pour le recouvrement en représentation des coordonnées.

# CHAPITRE III.

## METHODE DE LA COORDONNEE GENERATRICE POUR LES REACTIONS NUCLEAIRES.

### I.- CHOIX DE L'ESPACE VARIATIONNEL

#### 1) Introduction

Pour décrire le mouvement relatif de deux noyaux, on peut choisir un ensemble de fonctions d'ondes $\Phi_r^\lambda$ dépendant de deux paramètres, le paramètre r associé à la coordonnée R décrivant le mouvement relatif des deux noyaux, et le paramètre $\lambda$ qui engendre des changements dans la forme l'orientation ou la taille des noyaux en intéraction. Le paramètre $\lambda$ correspond à des coordonnées génératrices dans les problèmes d'états liés. Dans ce chapitre nous étudierons seulement le paramètre r.

#### 2) Invariance par translation

Nous restreignons notre choix à des fonctions génératrices qui peuvent s'écrire sous la forme suivante cf. (II.3)

$$\Phi_r(\vec{x}) = \Phi_{CM}\, \mathcal{A}\left[\Gamma(\vec{r},\vec{R})\, \psi_{int}(A)\, \psi_{int}(B)\right] \qquad (III.1)$$

où $\vec{x}$ représente l'ensemble des coordonnées des A + B nucléons. Dans cette expression $\Phi_{CM}$ représente la fonction d'onde du centre de masse, $\Gamma(\vec{r},\vec{R})$ une fonction piquée autour de $\vec{R}$ et $\psi_{int}$ (A) et $\psi_{int}$ (B) sont les fonctions des coordonnées internes des fragments, A et B étant une notation abrégée pour les combinaisons des $\vec{x}_1 \ldots \vec{x}_A$, $\vec{x}_{A+1} \ldots \vec{x}_B$ nucléons. Les fonctions $\psi_{int}(A)$ et $\psi_{int}(B)$ sont supposées antisymétrisées et l'opérateur $\mathcal{A}$ est l'opérateur d'antisymétrisation pour l'échange de nucléons entre les deux fragments. Par la factorisation à priori du centre de masse, sur laquelle nous reviendrons au cours de l'application au système $\alpha$-$\alpha$, on évite le problème de l'élimination des solutions non physiques liées au mouvement du centre de masse.

L'hypothèse de factorisation de la fonction $\Gamma(\vec{r},\vec{R})$ de l'éq. (III.1) est supposée vraie quel que soit $\vec{r}$ ce qui physiquement correspond à l'approximation soudaine. Il pourrait être physiquement plus interessant d'assouplir cette condition dans la région d'interaction. On pourrait généraliser l'éq. (III.1) quand $|r| < R_o$ en prenant le résultat d'un calcul de Hartree-Fock sous contrainte [11] par exemple (limite adiabatique), ou à un calcul du

modèle des couches à deux centres.

D'un autre côté, une généralisation, due à Tabakin [12] consiste à introduire une coordonnée génératrice additionnelle $\lambda$ qui rend compte des changements de forme, de volume et d'orientation au cours de la collision et la fonction génératrice (III.1) s'écrit dans ce cas

$$\phi^{\lambda}_{\vec{r}}(x) = \phi_{CM}\, \mathcal{A}\left[\Gamma(\vec{r},\vec{R})\, \psi^{\lambda}_{int}(A)\, \psi^{\lambda}_{int}(B)\right] \qquad (III.3)$$

pour la fonction d'onde d'essai correspondante

$$\psi(\vec{x}) = \int d^3\lambda\, d^3\vec{r}\, \phi^{\lambda}_{\vec{r}}(\vec{x})$$

La coordonnée génératrice $\lambda(\lambda_A\ \lambda_B)$ engendre certaines voies inélastiques dans la région asymptotique de telle sorte que le couplage entre la voie élastique et la voie inélastique est automatiquement inclus.

3) Cas de l'oscillateur harmonique

Si les deux noyaux sont décrits par des déterminants de Slater construits sur le modèle des couches, dans deux puits distants de r et de même paramètre d'oscillateur b le produit des déterminants aura la forme de l'équation (III.1) . Dans le modèle en agrégats $\alpha$ de Brink [9] les déterminants peuvent s'écrire sous cette forme si tous les paramètres $b_i$ qui définissent la taille des agrégats sont égaux.

Pour le modèle en agrégats où chacun des fragments est décrit dans une base d'oscillateur harmonique avec une seule couche majeure ouverte, la fonction du mouvement relatif est

$$\Gamma(\vec{r},\vec{R}) = \left(\sqrt{\pi}\,\beta\right)^{-3/2} e^{-\frac{(\vec{R}-\vec{r})^2}{2\beta^2}} \qquad (III.3)$$

avec $\beta^2 = b^2 \frac{M}{\mu}$, où $\mu$ est la masse réduite du système et M la masse du nucléon.

Par transformation de Fourier de l'éq. (III.1) par rapport au paramètre $\vec{r}$ on obtient un nouvel ensemble de fonctions indicées par le paramètre $\vec{q}$ associé au moment relatif des deux noyaux.

$$\Phi_{\vec{q}}(\vec{x}) = \Phi_{cm}\, \mathcal{A}\left[\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\beta}\right)^{-3/2} e^{-\frac{\beta^2 q^2}{2}} e^{i\vec{q}\vec{x}}\, \psi_{int}(A)\psi_{int}(B)\right]$$

et comme nous l'avons montré sur un modèle schématique [6] une renormalisation de cette fonction par le facteur

$$\left(2\sqrt{\pi}\,\beta\right)^{-3/2} e^{\frac{\beta^2 q^2}{2}}$$

pour la fonction d'onde du problème $\psi(x) = \int \Phi_q(x)\, f(q)\, dq$, conduit à la fonction utilisée dans les méthodes de groupes de résonances, à la fonction $\Phi_{CM}$ du centre de masse.

4) Calcul des noyaux

En représentation des coordonnées comme en représentation d'impulsion, les fonctions $\Phi_r$ eq. (III.1) sont des déterminants de Slater (ou des superpositions de déterminants), et le calcul des noyaux de l'intégrale de Hill et Wheeler est possible à l'aide des techniques de la seconde quantification [10].

Dans les appendices A, C et D on discute en détail le calcul des noyaux d'énergie cinétique, potentielle et de recouvrement.

## II.- SOLUTION DE L'EQUATION DE HILL-WHEELER POUR LES PROBLEMES DE DIFFUSION.

Nous allons comparer les différentes méthodes de solution de l'équation de Hill-Wheeler pour des fonctions génératrices ayant la forme (III.1) et nous rappelons ici la forme de la fonction du mouvement relatif (III.2).

1) Solution en représentation d'impulsion

Cette méthode qui a été développée à Saclay par Giraud et al [6] est donnée dans les appendices C et D. C'est une méthode qui s'affranchit dans une certaine mesure des conditions aux limites pour l'amplitude de Hill et Wheeler en ce sens que partant de ces conditions limites, par une transformation de Fourier on ramène l'équation de Hill et Wheeler à une équation de Schrodinger équivalente.

Au préalable on introduit l'opérateur $\Gamma$ tel que

$$\Gamma(\vec{r},\vec{R}) \otimes f(\vec{r}) = (\sqrt{\pi}\beta)^{-3/2} \int e^{-\frac{(\vec{R}-\vec{r})^2}{2\beta^2}} f(\vec{r})\, d\vec{r} = g(\vec{R})$$

où $f(\vec{r})$ est l'amplitude de Hill-Wheeler définie en (I.1). La fonction $g(\vec{R})$ est la fonction d'onde relative de la fonction d'onde de diffusion à N-corps. Les opérateurs H et N d'énergie et de recouvrement peuvent s'écrire maintenant

$$H = -\Gamma \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{R}} \Gamma + V'$$

$$N = \Gamma^2 + N'$$

où V' et N' sont des opérateurs non locaux et de courte portée.

L'opérateur N' est dû à l'antisymétrisation qui fait que $N(\vec{r},\vec{r}')$, dévie de sa forme asymptotique en $e^{-(\vec{r}-\vec{r}')^2/4b^2}$. L'opérateur V contient deux termes, l'un provenant du potentiel à deux corps de courte portée, l'autre terme provenant des corrections (dues à l'antisymétrisation) à l'énergie cinétique du mouvement relatif.

Des corrections supplémentaires à $N'(\vec{r},\vec{r}')$ et $V'(\vec{r},\vec{r}')$ peuvent provenir des déviations de $\Phi_{\vec{r}}(\vec{x})$ de la forme de l'éq. (III.1) dans la région d'interaction. Si les noyaux de l'intégrale de Hill-Wheeler sont calculés numériquement, et tant que ces déviations sont de courtes portées cela n'introduit pas de difficultés.

L'équation de Schrodinger équivalente en représentation d'impulsion est

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} q^2 \tilde{g}(\vec{q}) + \Gamma^{-1} V \Gamma^{-1} \tilde{g}(\vec{q}) - E\, \Gamma^{-1} N' \Gamma^{-1} \tilde{g}(\vec{q}) = E\, \tilde{g}(\vec{q})$$

où $\Gamma^{-1}.\tilde{g}(\vec{q})$ a la forme simple suivante, $\tilde{g}(\vec{q})$ étant la transformée de Fourier de $g(\vec{R})$

$$\Gamma^{-1}\, \tilde{g}(\vec{q}) = (2\sqrt{\pi}\beta)^{-3/2}\, e^{\frac{\beta^2 q^2}{2}}\, \tilde{g}(\vec{q})$$

Les opérateurs $\Gamma^{-1}$ v $\Gamma^{-1}$ et $\Gamma^{-1}$ n $\Gamma^{-1}$ peuvent donc être calculés en représentation d'impulsion par transformation de Fourier suivie d'une multiplication par le facteur :

$$\left(2\sqrt{\pi}\beta\right)^{-3} \; e^{\frac{\beta^2 q^2}{2}} \; e^{\frac{\beta^2 q'^2}{2}}$$

Malgré le caractère singulier de l'opérateur $\Gamma^{-1}$ , on peut montrer que les quantités $\omega = \Gamma^{-1}$ V $\Gamma^{-1}$, $\eta = \Gamma^{-1}$ N $\Gamma^{-1}$ et $\tau = \Gamma^{-1}$ T $\Gamma^{-1}$ sont toujours réguliers (6).

Finalement l'équation de Schrodinger équivalente à l'intégrale de Hill-Wheeler s'écrit

$$(k^2 - q^2)\tilde{g}(\vec{q}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d^3\vec{q}' \; W(\vec{q},\vec{q}')\,\tilde{g}(\vec{q}')$$

où k est le nombre d'onde relatif à l'énergie E et

$$W(\vec{q},\vec{q}') = \omega(\vec{q},\vec{q}') + \tau(\vec{q},\vec{q}') - E\,\eta(\vec{q},\vec{q}')$$

joue le rôle de pseudopotentiel non local et dépendant de l'énergie.

Un des avantages de cette méthode est surtout dû au fait que l'on travaille directement sur la fonction d'onde relative des deux fragements. L'autre avantage consiste à ramener l'équation de Hill et Wheeler à une équation de Schrodinger dans l'espace des impulsions, c'est à dire à une classe d'équations de Fredholm, pour laquelle il existe des méthodes de résolution numérique très précises (13,14,15).

2) Solution en représentation coordonnées.

Le problème comporte les deux aspects suivants

i) comment ramener l'équation (II.1)

$$(H - EN)f = 0$$

à un problème de diagonalisation

ii) Comment imposer des conditions aux limites à l'inconnue f ( ou à tout autre grandeur reliée) pour en extraire les déphasages.

a) Méthode de N. de Takacsy [16]

Cette méthode peut être résumée de la manière suivante : On choisit un rayon de coupure $S_o$ suffisamment grand et on scinde l'intégrale de Hill et Wheeler en deux parties de telle sorte que

$$\int_o^{S_o} \left[ H_\ell(r,r') - E N_\ell(r,r') \right] f_\ell(r) d^3r' = - \int_{S_o}^{\infty} \left[ H_\ell(r,r') - E N_\ell(r,r') \right] f_\ell(r') d^3r'$$

et dans le second terme de l'égalité précédente, on remplace l'amplitude de Hill et Wheeler par sa forme asymptotique

$$f_\ell(r) = j_\ell(kr) + B_\ell \, n_\ell(kr)$$

où $j_\ell(kr)$ et $n_\ell(kr)$ sont les fonctions de Bessel et de Neumann sphériques d'ordre $\ell$ correspondant au nombre d'onde k, et $B_\ell$ est relié à $tg\delta_\ell$, déphasage pour l'onde $\ell$.

$$B_\ell = tg\left(\delta_\ell - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

Cette méthode conduit donc à résoudre le système suivant :

$$\int_o^{S_o} \left[ H_\ell(r,r') - E N_\ell(r,r') \right] f_\ell(r') d^3r'$$

$$\begin{Bmatrix} F_\ell(r) \\ G_\ell(r) \end{Bmatrix} = - \int_o^{S_o} \left[ H_\ell(r,r') - E N_\ell(r,r') \right] \begin{Bmatrix} j_\ell(kr) \\ n_\ell(kr) \end{Bmatrix} d^3r'$$

où la résolution est achevée par discrétisation de la partie interne.

De Tacaksy montre que la solution f(r) n'est pas stable en fonction du réseau d'intégration ce qui conduit cependant à des déphasages stables.

Cette méthode a été utilisée par Friedrich et al [17] pour l'étude de la diffusion élastique du système α-α en présence de l'interaction coulombienne. Les calculs conduisent à des courbes de déphasages qui sont systématiquement moins correctes que celles obtenues par la méthode indirecte [22], ou plus récemment par Beck, Brink et Mihailovic [21]. Les figures 5, 6, 7 et 8 résument la situation pour les basses énergies ($E_{CM}$ < 15 MeV).

Un inconvénient dans la méthode de de Tacaksy est du au fait que la stabilité vis à vis du rayon de coupure $S_o$ ne semble pas avoir été clairement établie (voir appendice A page 1278)

b) Seconde méthode.[19]

On peut chercher un opérateur C qui rende la quantité $(C^{-1})^{+}NC^{-1}$ unitaire à une petite correction $\Omega$ près. La nouvelle inconnue est Cf et l'éq. (II.1) s'écrit alors

$$\left[(C^{-1})^{\dagger} H C^{-1} - E(1+\Omega)\right] Cf = 0$$

Le choix le plus simple consiste à prendre $C = \Gamma$ et dans ces conditions on a directement à résoudre le problème avec pour inconnue

$$g = \Gamma f$$

qui est la fonction d'onde relative de diffusion, dont les propriétés asymptotiques sont bien connues. En outre, $N = \Gamma^{+}\Gamma$ asymptotiquement ce qui entraine $\Omega = 0$ à l'infini, et on peut considérer $\Omega$ comme une petite perturbation, tout au moins hors de la région d'intéraction.

Cependant l'inversion de $\Gamma$ en représentation de coordonnées n'est pas une opération aisée. Si dans cette méthode on avait un moyen d'inverser $\Gamma$ proprement, nous aurions un outil efficace du point de vue physique car on travaille directement sur la fonction d'onde relative de diffusion.

c) Méthode de Yukawa[18]

Appelons $X_{\vec{r}}$ la fonction d'onde produit qui par antisymétrisation donne $\Phi_{\vec{r}}(\vec{x})$ de telle sorte que

$$\phi_{\vec{r}}(\vec{x}) = \mathcal{A} X_{\vec{r}}(\vec{x})$$

Pour un hamiltonien symétrique dans l'échange des coordonnées des nucléons on a l'identité suivante

$$\langle \phi_{\vec{r}} | H | \phi_{\vec{r}} \rangle = \langle X_{\vec{r}} | H | \phi_{\vec{r}} \rangle$$

on peut d'autre part décomposer le Hamiltonien total en

$$H = T_1(\vec{R}^{(1)}_{CM}) + T_2(R^{(2)}_{CM}) + h_1 + h_2 + V_{12}$$

où $T_i(\vec{R}^{(i)}_{CM})$ est l'opérateur d'énergie cinétique du centre de masse pour l'agrégat i, $h_i$ son hamiltonien interne et $V_{12}$ la somme des interactions à deux corps entre les nucléons.

La fonction du centre de masse dépend de la différence $\vec{R}^{(i)}_{CM} - \vec{r}$ et on a

$$T_i(R^{(i)}_{CM})\,\phi_{\vec{r}}(\vec{x}) = T_i(\vec{r})\,\phi_{\vec{r}}(\vec{x})$$

ce qui conduit à résoudre l'équation intégrale suivante

$$\left[T(\vec{r}) - E_{rel}\right]\int N(\vec{r},\vec{r}')\,f(\vec{r}')\,d^3\vec{r}' + \int \langle X_{\vec{r}}|V_{12}|\phi_{\vec{r}}\rangle\, f(\vec{r}')\,d^3\vec{r}' = 0$$

Yukawa appelle $g_y(\vec{r})$ la quantité

$$g_y(\vec{r}) = \int N(\vec{r},\vec{r}')\,f(\vec{r}')\,d^3\vec{r}'$$

d'où l'équation $\left(T(\vec{r}) - E_{rel}\right) g_y(\vec{r}) + \int K_y(\vec{r},\vec{r}')\,g_y(\vec{r})\,d^3\vec{r}' = 0$

où $K_y(\vec{r},\vec{r}') = \int \langle X_{\vec{r}}|V_{12}|\phi_{\vec{r}'}\rangle\, N^{-1}(\vec{r},\vec{r}')\, d^3\vec{r}'$

L'existence de l'inverse $N^{-1}(\vec{r},\vec{r}')$ nécessite l'exclusion de l'espace de Hilbert des états propres du recouvrement correspondant à des valeurs propres nulles.

Pour utiliser la méthode de Yukawa il faut d'abord construire le noyau $K_y(\vec{r},\vec{r}')$ ce qui n'est pas très aisé puisqu'il faut savoir également construire l'inverse du noyau de recouvrement qui contient des termes d'échange compliqués.

D'autre part $H\,N^{-1}$ n'est plus hermitique et la signification de $g_y(\vec{r})$ reste à préciser.

# CHAPITRE IV

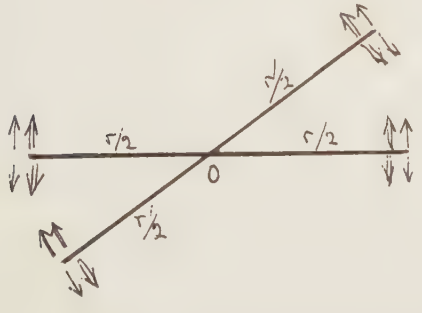
## TRAITEMENT D'UN CAS REALISTE
## DIFFUSION ELASTIQUE DE PARTICULES α.

Dans ce chapitre nous allons procéder à un calcul dans un cas réaliste, la diffusion élastique d'une particule par une autre particule α. Ce calcul constitue un test de la méthode indirecte que nous avons exposée au chapitre précédent.

Nous avons choisi ce système d'une part pour sa simplicité puisqu'il y a peu de nucléons mis en jeu et d'autre part parce qu'il existe beaucoup de résultats expérimentaux. Nous montrerons comment choisir les fonctions génératrices et, à l'aide d'une technique de seconde quantification, comment calculer les noyaux de recouvrement, d'énergie cinétique et d'énergie potentielle. Nous exposerons également une méthode basée sur un calcul par récurrence pour tenir compte du potentiel coulombien tronqué.

## I.- INTRODUCTION

On rappelle qu'on cherche un ensemble de fonctions $\Phi_{\vec{r}}$, dépendant d'un indice continu $\vec{r}$, la coordonnée génératrice et décrivant les deux noyaux (A) et (B). Le formalisme a pour but de trouver la fonction à N-corps qui par le choix de $\Phi_{\vec{r}}$, et le calcul ultérieur de f, décrit la diffusion des deux agrégats.




Chaque particule α est composée de deux protons l'un de spin dirigé vers le haut (⇑) l'autre de spin dirigé vers le bas (⇓) et de deux neutrons (↑↓) de spins opposés également comme l'indique le schéma ci-contre.

Rappelons que dans la GCM, on traite tous les nucléons de la même façon si on ne sait pas factoriser le mouvement du centre de masse, on ne sait pas éliminer les solutions non physiques qu'il introduit. Si on fait l'hypothèse que tous les nucléons sont astreints à se mouvoir sur des

orbitales Os de l'oscillateur harmonique centré à +r/2 et -r/2 c'est à dire sur les fonctions d'onde

$$\pi^{-3/4} b^{-3/2} \; e^{-\frac{(\vec{r}_i - \vec{y})^2}{2b^2}} \qquad (\text{IV}.1)$$

($\vec{y}$ désigne $\pm\vec{r}/2$)

on peut obtenir une factorisation du centre de masse. En effet la partie radiale de la fonction d'onde est

$$\Phi_{\vec{r}} = \left(\pi^{-3/4} b^{-3/8}\right)^8 \mathcal{A}_b \left\{ \prod_{i=1}^{4} e^{-\frac{(\vec{r}_i - \vec{r}/2)^2}{2b^2}} \prod_{j=5}^{8} e^{-\frac{(\vec{r}_j + \vec{r}/2)^2}{2b^2}} \right\} \qquad (\text{IV}.2)$$

en appelant $\vec{r}_i$ et $\vec{r}_j$ les coordonnées individuelles des nucléons, $\vec{r}$ la coordonnée génératrice, $\mathcal{A}$ l'opérateur d'antisymétrisation et b la constante de l'oscillateur harmonique. En opérant dans $\Phi_r$ le changement de coordonnées suivant

$$\vec{R}_A = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{4} \vec{r}_i \qquad \vec{R}_B = \frac{1}{4} \sum_{j=5}^{8} \vec{r}_j$$

$$\vec{R}_{CM} = \frac{1}{2} \left(\vec{R}_A + \vec{R}_B\right) \qquad \vec{R} = \vec{R}_A - \vec{R}_B$$

où $\vec{R}_A$ et $\vec{R}_B$ sont les coordonnées de centre de masse des agrégats A et B, $\vec{R}_{CM}$ la coordonnée du centre de masse total, et $\vec{R}$ la coordonnée relative l'expression (IV.2) devient

$$\Phi_{\vec{r}} = \pi^{-3/4} (b/2)^{-3/2} \; e^{-\frac{4R_{CM}^2}{b^2}} \; \mathcal{A}_b \left[\psi_{int}(A)\, \psi_{int}(B)\, \Gamma(\vec{r},\vec{R})\right] \qquad (\text{IV}\ 3)$$

qui est bien conforme à l'éq. (III.1)

Comme prévu le centre de masse est factorisé et nous allons ignorer ce terme tout au long de la suite. Les fonctions $\psi_{int}(A)$ et $\psi_{int}(B)$ sont les fonctions d'onde internes des fragments A et B et la fonction $\Gamma(\vec{r},\vec{R})$ représente

$$\Gamma(\vec{r},\vec{R}) = \pi^{-3/4} \left(b/\sqrt{2}\right)^{-3/2} \; e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{R})^2}{b^2}} \qquad (\text{IV}\ 4)$$

est une fonction piquée autour de la valeur $\vec{r} = \vec{R}$, elle mesure les fluctuations de $\vec{R}$ autour de $\vec{r}$.

En introduisant maintenant l'expression (IV.3) de la fonction génératrice dans la fonction d'onde de Hill et Wheeler eq (I.1) on obtient (cf chapitre III)

$$\Psi = \mathcal{A}\{\Psi_{int}(A)\,\Psi_{int}(B)\,g(\vec{R})\} \qquad (IV.5)$$

où

$$g(\vec{R}) = \pi^{-3/4}\,(b/\sqrt{2})^{-3/2}\int e^{-\frac{(\vec{R}-\vec{r})^2}{b^2}} f(\vec{r})\,d^3\vec{r} \qquad (IV.6)$$

soit encore

$$g = \Gamma \otimes f. \qquad (IV.7)$$

La notation $\otimes$ signifie produit de convolution

## II.- PROPRIETES DE L'AMPLITUDE DE HILL-WHEELER.

Ecrivons à nouveau l'éq.(II.1) sous forme d'opérateur $(H-EN)f = 0$. On sait [6] que la solution de cette équation n'est pas indépendante du réseau d'intégration à cause du caractère de distribution de f. Cela peut se montrer aisément par une transormée de Fourier de l'éq.(IV.7). En effet sachant que, sous réserve qu'elle existe, la transformée de Fourier d'un produit de convolution est égale au produit des transformées de Fourier, nous avons

$$g(\vec{q}) \propto \Gamma(\vec{q})\,f(\vec{q}) \qquad (IV.8)$$

avec

$$\Gamma(\vec{q}) = 2\,(2\pi)^{3/4}\,b^{3/2}\,e^{-\frac{b^2q^2}{4}} \qquad (IV.9)$$

et par conséquent, l'inversion de l'éq.(IV.8) montre que

$$f(\vec{q}) = e^{\frac{b^2q^2}{4}}\,g(\vec{q}) \qquad (IV.10)$$

et par suite, f(q) ne possède pas de transformée de Fourier pour repasser à la représentation des coordonnées. Pour les problèmes d'états liés $g(\vec{q})$ peut décroitre suffisamment vite pour que l'on puisse remplacer la borne infinie de l'intégrale Hill Wheeler par une borne finie et résoudre dans l'espace des coordonnées. Pour les problèmes de diffusion, notre cas, la méthode consistera à ramener l'équation de Hill et Wheeler à une équation de Schrodinger dans l'espace des impulsions.

## III.- SOLUTIONS DU SYSTEME.

Notre problème consiste à inverser l'éq. (III.6). Pour ce faire, une double transformée de Fourier montre que les noyaux de recouvrement d'énergie cinétique et d'énergie potentielle sont suffisamment convergents

en q et q' pour compenser les divergences en q et q' qu'introduit dans cette représentation la fonction d'onde relative $g(\vec{q})$. L'équation à résoudre dans laquelle il ne reste plus de divergence en exponentielle quadratique, est alors

$$\Gamma^{-1}\,(H - EN)\,\Gamma^{-1}\,g = 0$$

ce qui conduit comme nous l'avons vu au chapitre précédent eq. (III.11) à résoudre une équation de Fredholm

$$(k^2 - q^2)\,g(\vec{q}) = \int W(\vec{q},\vec{q}')\;\; g(\vec{q}')\; d^3\vec{q}'$$

pour laquelle il existe des méthodes numériques de résolution très précises [13,14]. Le détail des expressions constituant $W(\vec{q},\vec{q}')$ est donné dans l'appendice A.

## V.- TRAITEMENT DU POTENTIEL COULOMBIEN

Pour traiter le cas de la diffusion des particules α par la méthode de transformée de Fourier il nous faut faire une hypothèse supplémentaire. En effet, la méthode d'obtention des déphasages utilisée (appendices C et D) n'est valable que pour des potentiels obéissant aux conditions limites suivantes :

$$\lim_{x \to 0} \quad x^2\, V(x) = 0$$

$$\lim_{x \to \infty} \quad x\, V(x) = 0$$

La seconde condition exclut le potentiel coulombien en 1/r de 0 à ∞. Nous avons donc choisi la forme suivante

$$V(R) = \frac{z^2 e^2}{R} \qquad R \leq R_0$$

et

$$V(R) = 0 \qquad R > R_0$$

En définissant ainsi V(R) on ne peut plus conduire analytiquement les calculs car les éléments de matrice sont des fonctions erreur (erf) qui ne possèdent pas de transformée de Fourier

L'hypothèse que nous introduisons peut être résumée ainsi : lorsque les deux particules sont en interaction coulombienne , les échanges d'un proton entre les particules α sont beaucoup moins probables que les processus sans échange du tout ou d'échange total, c'est à dire des deux protrons.

Pour préciser cette approximation examinons le cas des deux paires de protons en présence (les neutrons se recouvrant indépendamment) Les seuls graphes possibles (puisque $V_c(R)$ n'agit qu'entre les differents agregats) sont représentés à la page suivante et correspondent respectivement à :

- aucun échange de protons entre les particules α : terme direct D.
- l'échange des deux protons de chaque particule α : terme d'échange total E.
- différentes possibilités d'échange d'un proton de chaque particule α : termes S, T, A, B.

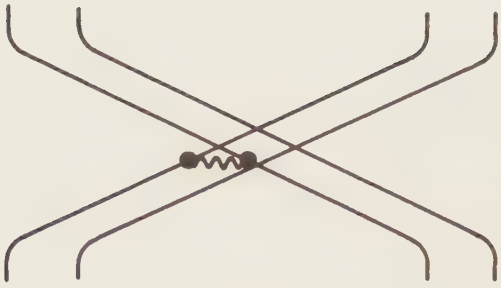
Notre calcul du potentiel coulombien n'inclut que les graphes du type D et E. Nous allons montrer que ceux-ci sont prépondérants.

Appelons $\varphi_1\varphi_2$ le produit antisymétrisé des fonctions d'onde des deux protons de la première particule α et $\varphi_3\ \varphi_4$ celui de la seconde particule α, convenons que les $\varphi_i$ dépendent de r' dans l'état initial et de r dans l'état final. Il nous faut calculer, puisque le potentiel coulombien est symétrique dans l'échange des coordonnées des protons, les éléments de matrice du type suivant :

$$\left\langle \prod_{i=1}^{2} \varphi_i(\vec{r}') \prod_{j=3}^{4} \varphi_j(\vec{r}') \,\middle|\, \sum_{\substack{i=1,2 \\ j=3,4}} V_{ij} \,\middle|\, \mathcal{A}\left[ \prod_{i=1}^{2} \varphi_i(\vec{r}) \prod_{j=3}^{4} \varphi_j(\vec{r}) \right] \right\rangle$$

Choisissons l'un des $V_{ij}$, par exemple $V_{13}$et associons à chaque graphe un élément de matrice typique.

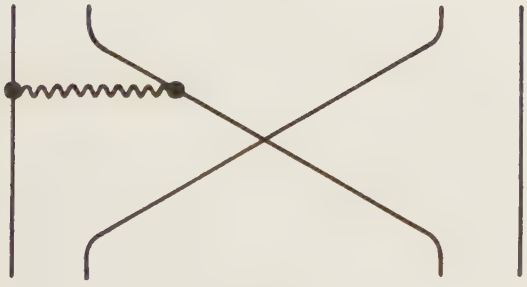
D



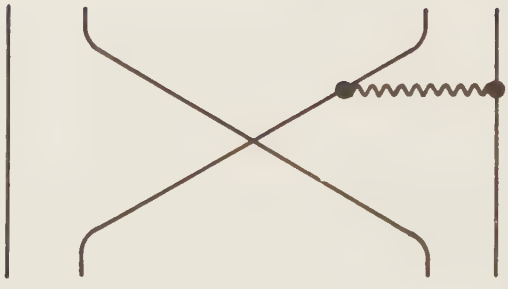
E

A

B



S



T

Graphes D et E : A ces graphes contribuent des éléments de matrice du type

$$D = \langle \varphi_1(-\vec{r}')\varphi_2(-\vec{r}')\varphi_3(\vec{r}')\varphi_4(\vec{r}') \mid V_{13} \mid \varphi_1(-\vec{r})\varphi_2(-\vec{r})\varphi_3(\vec{r})\varphi_4(\vec{r}) \rangle$$

$$E = \langle \varphi_1(-r')\varphi_2(-r')\varphi_3(r')\varphi_4(r') \mid V_{13} \mid \varphi_3(-r)\varphi_4(-r)\varphi_1(r)\varphi_2(r) \rangle$$

soit

$$D = \langle \varphi_1(-\vec{r}')\varphi_3(\vec{r}') \mid V_{13} \mid \varphi_1(-\vec{r})\varphi_3(\vec{r}) \rangle \langle \varphi_2(-\vec{r}') \mid \varphi_2(\vec{r}) \rangle \langle \varphi_4(\vec{r}') \mid \varphi_4(\vec{r}) \rangle$$

avec $\langle \varphi_i(u) \mid \varphi_i(v) \rangle = e^{-\frac{(\vec{u}-\vec{v})^2}{4b^2}}$

si les $\varphi_i$ sont des orbitales O S de l'oscillateur harmonique

D'autre part l'opérateur considéré ici est à longue portée,et varie lentement, on peut donc écrire

$$\langle \varphi_1(-\vec{r}')\varphi_3(\vec{r}') \mid V_{13} \mid \varphi_1(-\vec{r})\varphi_3(\vec{r}) \rangle \approx f_D(\vec{r},\vec{r}') \langle \varphi_1(-\vec{r}') \mid \varphi_1(-\vec{r}) \rangle \langle \varphi_3(\vec{r}') \mid \varphi_3(\vec{r}) \rangle$$

où $f_D(r,r')$ est une fonction lentement variable.
D'où

$$D \propto f_D(\vec{r},\vec{r}') \left[ e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{4b^2}} \right]^4$$

Le même type de calcul conduit à

$$E \propto f_E(\vec{r},\vec{r}') \left[ e^{-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{4b^2}} \right]^4$$

Graphes S et T , A et B :

Par un même type de raisonnement on trouve

$$S \propto f_S(\vec{r},\vec{r}')\ N_+ N_-$$

$$T \propto f_T(\vec{r},\vec{r}')\ N_+ N_-$$

$$A \propto f_A(\vec{r},\vec{r}')\ N_+ N_-$$

$$B \propto f_B(\vec{r},\vec{r}')\ N_+ N_-$$

avec

$$N_+ N_- = \left[ e^{-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{4b^2}} \right]^2 \left[ e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{4b^2}} \right]^2$$

et les fonctions $f_D$, $f_E$, $f_S$, $f_T$, $f_A$ et $f_B$ ont la même dépendance en r et r'

Dans ces conditions, si $\vec{r} = \vec{r}'$ la contribution de D est prépondérante celle de S, T, A et B est du second ordre tandis que celle de E est du quatrième ordre. Au contraire si $\vec{r} = -\vec{r}'$ la contribution de E est prépondérante celle de D est du quatrième ordre, tandis que les contributions de S, T, A et B restent du second ordre.

Sous cette hypothèse simplificatrice nous introduisons directement le potentiel coulombien en représentation d'impulsion et suivant par exemple la réf 23, on pose

$$E\, g(\vec{q}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} q^2 g(\vec{q}) + \int v_c(\vec{q}-\vec{q}')\, g(\vec{q}')\, d^3\vec{q}' \qquad (IV.11)$$

avec

$$v_c(\vec{q}-\vec{q}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{R}}\, V(\vec{R})\, d^3\vec{R} \qquad (IV.12)$$

ce qui conduit par projection sur les ondes partielles à

$$(k^2-q^2)\, g_\ell(q) = \frac{2}{\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty I_\ell(q,q')\, g(q')\, q'^2\, dq' \qquad (IV.13)$$

où

$$I_\ell(q,q') = \int_0^\infty j_\ell(qR)\, j_\ell(q'R)\, V(R)\, R^2\, dR \qquad (IV.14)$$

Dans cette dernière expression $j_\ell(x)$ représente la fonction de Bessel sphérique d'ordre $\ell$. Si $V_c(R)$ est tronqué, comme nous l'avons indiqué plus haut, il n'existe pas de formule analytique pour l'intégrale (IV.14) et nous avons dû développer les lois de récurrence pour $I_\ell$ qui sont exposées dans l'appendice B de l'article principal de cette thèse.

L'introduction du potentiel coulombien se ramène à ajouter au pseudo potentiel W(q,q') défini à l'éq. (III.12) le terme défini en (IV.13), que nous calculons numériquement.

Nous avons également, pour essayer de tenir compte d'une façon grossière des termes négligés, lorsque les deux α s'interpénètrent, remplacé le potentiel coulombien défini en (IV.10) par l'expression

$$V(R) = \frac{Z^2 e^2}{2R}\left(3 - \frac{R^2}{X_\alpha^2}\right) \qquad 0 < R \leq 2X_\alpha$$

$$V(R) = \frac{Z^2 e^2}{R} \qquad 2X_\alpha < R \leq R$$

$$V(R) = 0 \qquad R > R_o$$

où $x_\alpha$ représente (voir ref.22) le rayon de la particule α. Cela ne se traduit par aucun changement des déphasages.

RESULTATS

Le but du problème était de tester dans un cas réaliste, la validité d'application d'un méthode développée sur un modèle schématique. Un autre point rendant la méthode de calcul utile résidait dans l'absence de parametrisation ou d'ajustement de constantes à des valeurs expérimentales. On se donne une base commode, telle que celle de l'oscillateur harmonique, que l'on limite à la couche Os et on se donne également une force nucléaire phénoménologique. La seule constante numérique du problème est la valeur de la constante b de l'oscillateur harmonique que l'on obtient à partir du rayon, expérimentalement déterminé, de la particule $\alpha$.

A l'exception du potentiel coulombien, tous les calculs sont effectués analytiquement, et le principe de Pauli est exactement pris en compte.

Sur les figures 1, 2, 3 et 4 on peut voir les courbes de déphasages, calculées avec la force de Volkov, pour les ondes $\ell$ = 0, 2, 4 et 6. On compare ces courbes aux valeurs expérimentaleset on peut remarquer que l'accord est assez bon même à des énergies élevées. Nous retrouvons bien dans les ondes $\ell$ = 2 et $\ell$ = 4 les résonances situées expérimentalement à 2.90 et 11.4 MeV.

Sur la figure 1 également, nous avons montré des résultats obtenus avec force de Brink et Boeker B1. Les autres résultats (ondes $\ell$= 2, 4, 6) ne sont pas donnés ici. Les résultats obtenus avec une force de Brink et Boeker s'ils ont toujours l'allure requise, sont systématiquement en dessous des valeurs obtenues avec la force de Volkov et ce résultat est confirmé, tout au moins pour les basses valeurs de l'énergie par des calculs de Brink et al [21] qui utilisent la procédure variationnelle exposée au chapitre III. Cet accord entre les deux types de calculs permet une certaine confiance dans la méthode. Sur les figures 5, 6 et 7 on compare les résultats obtenus par Brink et al.[21], Freidrich et al [17] ainsi que les résultats que nous avons obtenus. Il semble claire que la méthode de de Tacaksy [16] soit discutable quand l'Hamiltonian comprend le terme d'interaction coulombienne.

En l'absence du potentiel coulombien, notamment pour les déphasages du système di-neutron-di-neutron, les résultats de de Tackasy et nos résultats sont comparables. De plus, des calculs effectués par la méthode indirecte et avec le même choix de la force nucléaire nous permettent de confirmer les résultats obtenus par de Tacaksy pour le système $\alpha$-$\alpha$

# CONCLUSION

Nous avons au cours de ce travail, entrepris l'extension des méthodes de coordonnée génératrice à des problèmes de diffusion. Cela nous a permis de développer un formalisme permettant de résoudre l'équation de Hill et Wheeler dans le continu, et, contrairement à Brink et Weiguny qui proposent l'emploi de coordonnées génératrices complexes, nous ne faisons appel qu'à des coordonnées réelles. Le problèmes de la collision élastique de deux noyaux est ramené à un problème de diffusion d'une particule par un potentiel non local et dépendant de l'énergie dans lequel apparait explicitement le rôle du principe de Pauli, un avantage de ce formalisme étant de permettre également l'emploi de la seconde quantification. Il y a néanmoins quelques inconvénients à l'emploi de cette méthode :

- on ne tient compte que d'une seule voie dans la réaction
- les noyaux intervenant dans la collision sont considérés comme incompressibles dans la mesure où le paramètre b garde une valeur constante au cours de la réaction.
- Enfin les noyaux de recouvrement N, T et V deviennent très difficiles à calculer si on passe à une autre couche majeure que la couche Os de l'oscillateur harmonique.

L'extension de ce travail à une déformation des particules $\alpha$ est actuellement à l'étude mais il n'est plus maintenant possible de conserver les expressions analytiques.

En conclusion, la méthode de la coordonnée génératrice permet dans un cadre relativement simple de traiter microscopiquement les effets collectifs. La résolution de l'équation d'onde à N- corps à laquelle on est conduit est toujours difficile. Dans certains cas simples cette équation peut être résolue directement, et l'extension de la méthode aux réactions nucléaires a stimulé l'intérêt porté à cette méthode.

## REFERENCES.


(1) - D.L. Hill et J.A. Wheeler ; Phys Rev. 89 (1953) 1102.

(2) - D.M. Brink et A. Weiguny ; Nucl. Phys. A120 (1968) 59,
D.M. Brink ; cours à l'université d'Orsay (1969).

(3) - B. Giraud , J. Le Tourneux et R. Osnes à paraître dans Ann. of Phys.

(4) - M. Feshbach ; Ann. Phys. 5 (1958) 357.
M. Feshbach ; Ann. Phys. 19 (1962) 287.

(5) - J.J. Griffin et J.A. Wheeler ; Phys. Rev. 108 (1957) 311.

(6) - B. Giraud, J.C. Hocquenghem et A. Lumbroso ; Phys. Rev. C7 (1972) 227 ;
B. Giraud, J.C. Hocquenghem et A. Lumbroso ; cours C6 colloque de
La Toussuire (1971) LYCEN 7104.

(7) - J.A. Wheeler ; Phys. Rev. 52 (1937) 1087, 1107.

(8) - K. Wildermuth et W. Mc. Clure ; Cluster Representations of nuclei
Springer, Berlin (1966).

(9) - D.M. Brink ; Proceedings of the International School of Physics
"Enrico Fermi" course 36, C. Bloch ed. (Academic New-York 1966).

(10) - P.Ö. Lowdin ; Phys. Rev. 97 (1955) 1474.

(11) - B. Giraud, J. Le Tourneux, et S.K.M. Wong ; Phys. Lett. 32 B (1970) 23.

(12) - F. Tabakin ; Nucl. Phys. (1972) A182 497.

(13) - J.S. Schwinger ; Phys. Rev 93 (1954) 615.

(14) - M. Baker ; Ann. of Phys. 4 (1958) 271.

(15) - R. Jost et A. Pais ; Phys. Rev. 82 (1951) 840.

(16) - N de Tacacksy ; Phys. Rev. C5 (1972) 1883.

(17) - H. Friedrich, H. Husken et A. Weiguny ; Nucl. Phys. A220 (1974) 1.

(18) - T. Yukawa ; Phys. Letters 38B (1972) 1.

(19) - M.V. Mihailovic et M. Rosina ed.Physica 5 (1975) supplement

(20) - M. Kohn ; Phys. Rev. 74 (1948) 1763.

(21) - R. Beck, M.V. Mihailovic et D.M. Brink ; Preprint Oxford (1974)
45/74 et Cptes Rend. Conf d'Amsterdam Septembre 1974

(22) - A. Lumbroso ; Phys. Rev. C10 (1974) 1271 (article principal de cette thèse).

(23) - A. Messiah ; Mécanique Quantique : Tome 1 p. 276, Dunod ed. 1962.

## LEGENDE DES FIGURES

Fig. 1.- Déphasage pour l'onde $\ell = 0$. La courbe en traits pleins représente les résultats obtenus avec la force de Volkov (éq. 37 de l'appendice A). La courbe en traits pointillés représente les résultats obtenus avec la force de Brink B1, (éq.38 de l'appendice A). Les points expérimentaux sont représentés par des +.

Fig. 2.- Déphasage pour l'onde $\ell = 2$. Cette courbe représente les résultats obtenus avec la force de Volkov (éq. 37 de l'appendice A). Les points expérimentaux sont représentés par des +.

Fig. 3.- Déphasage pour l'onde $\ell = 4$. Même légende que pour la figure 2.

Fig. 4.- Déphasage pour l'onde $\ell = 6$. Même légende que pour la figure 2.

Fig. 5.- Déphasage pour l'onde $\ell = 0$. Les courbes 2 et 4 représentent les résultats obtenus par la méthode indirecte [22] pour les potentiels de Volkov et de Brink et Boeker B1. Les courbes 1 et 3 représentent les résultats obtenus par des méthodes directes par Beck et al[21] et par Friedrich et al[17]

Fig. 6.- Déphasage pour l'onde $\ell = 2$. Même légende que pour la figure 5.

Fig. 7.- Déphasage pour l'onde $\ell = 4$ Même légende que pour la figure 5.

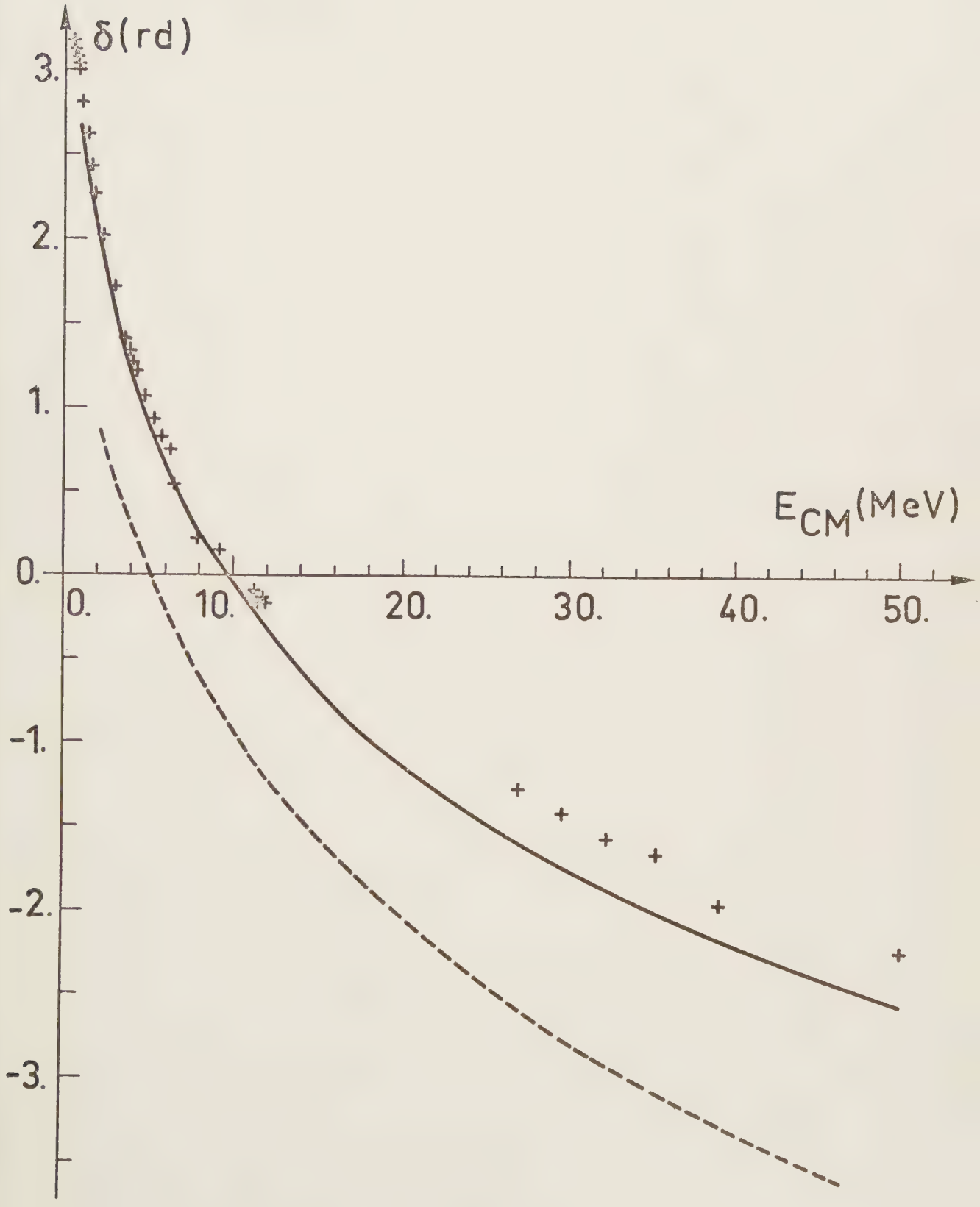



FIG. 1

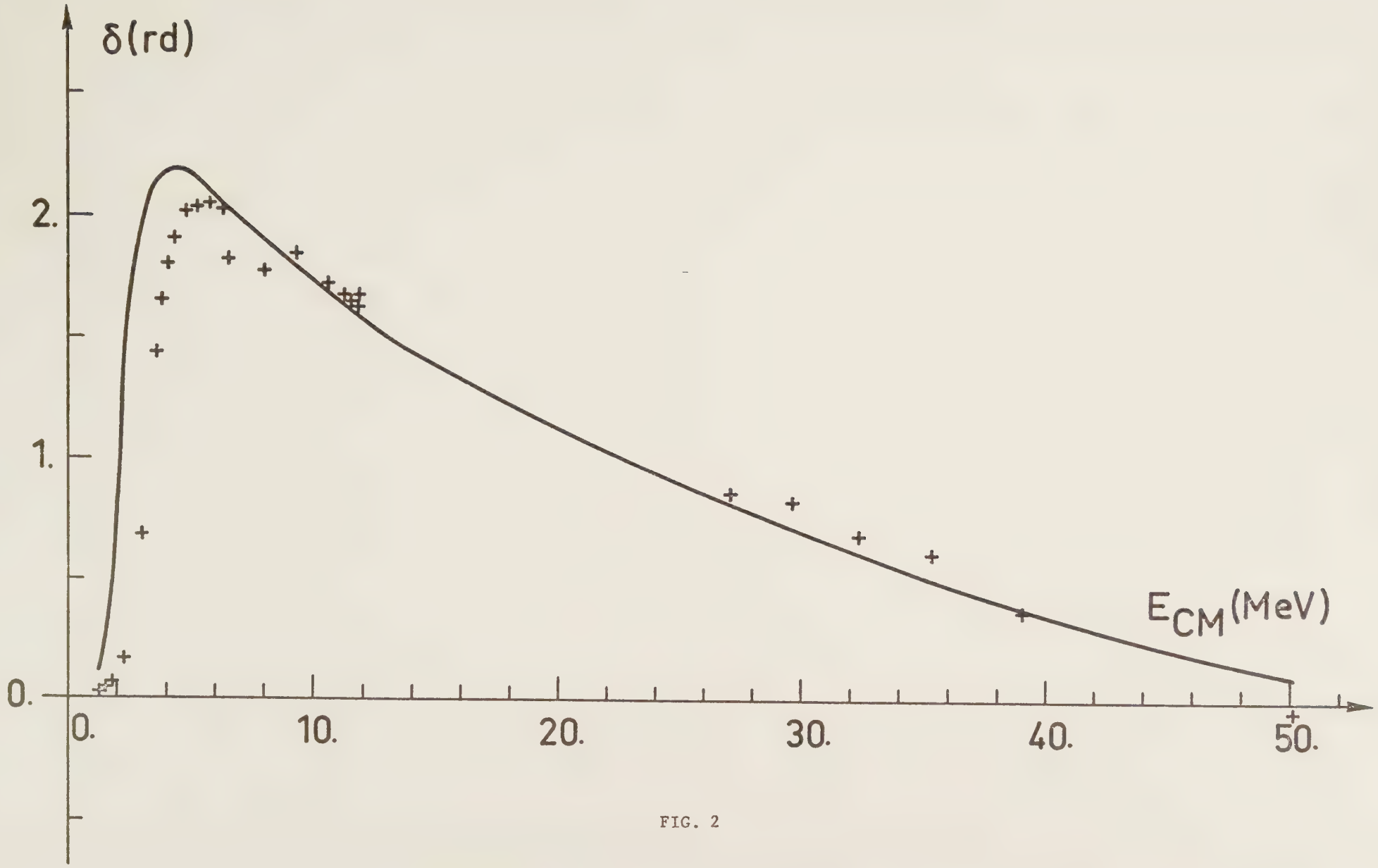



FIG. 2

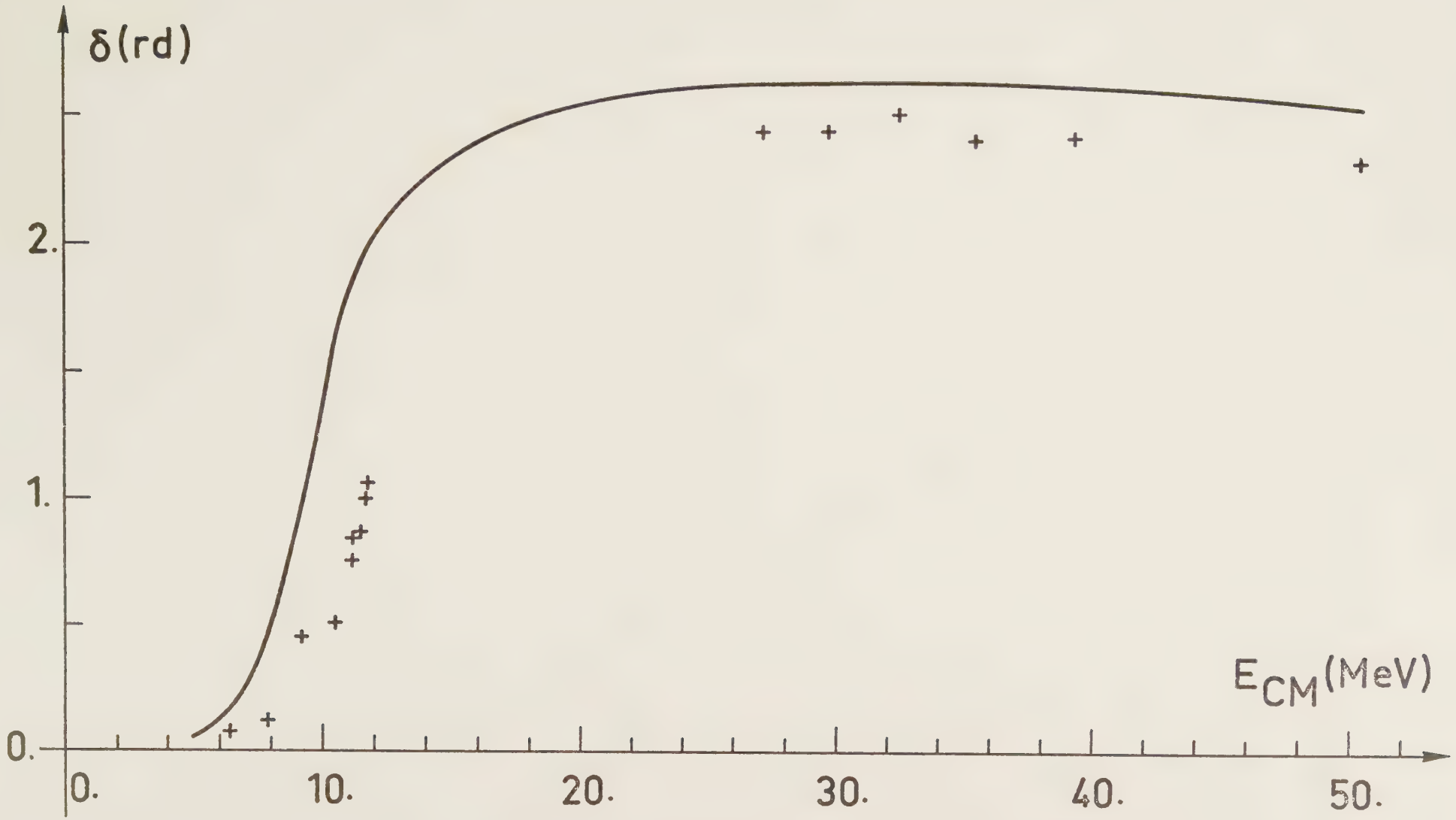



FIG. 3

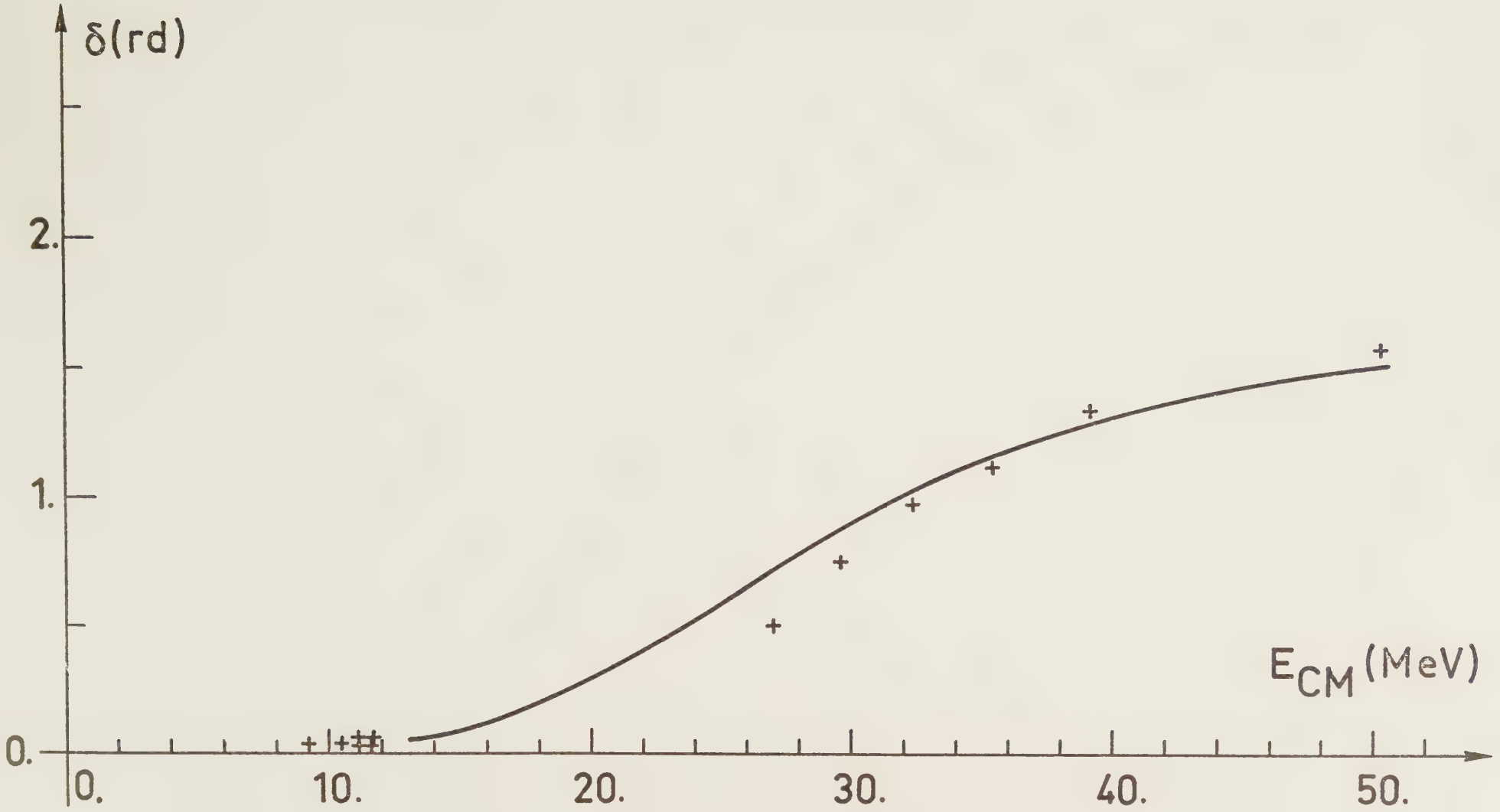



FIG. 4

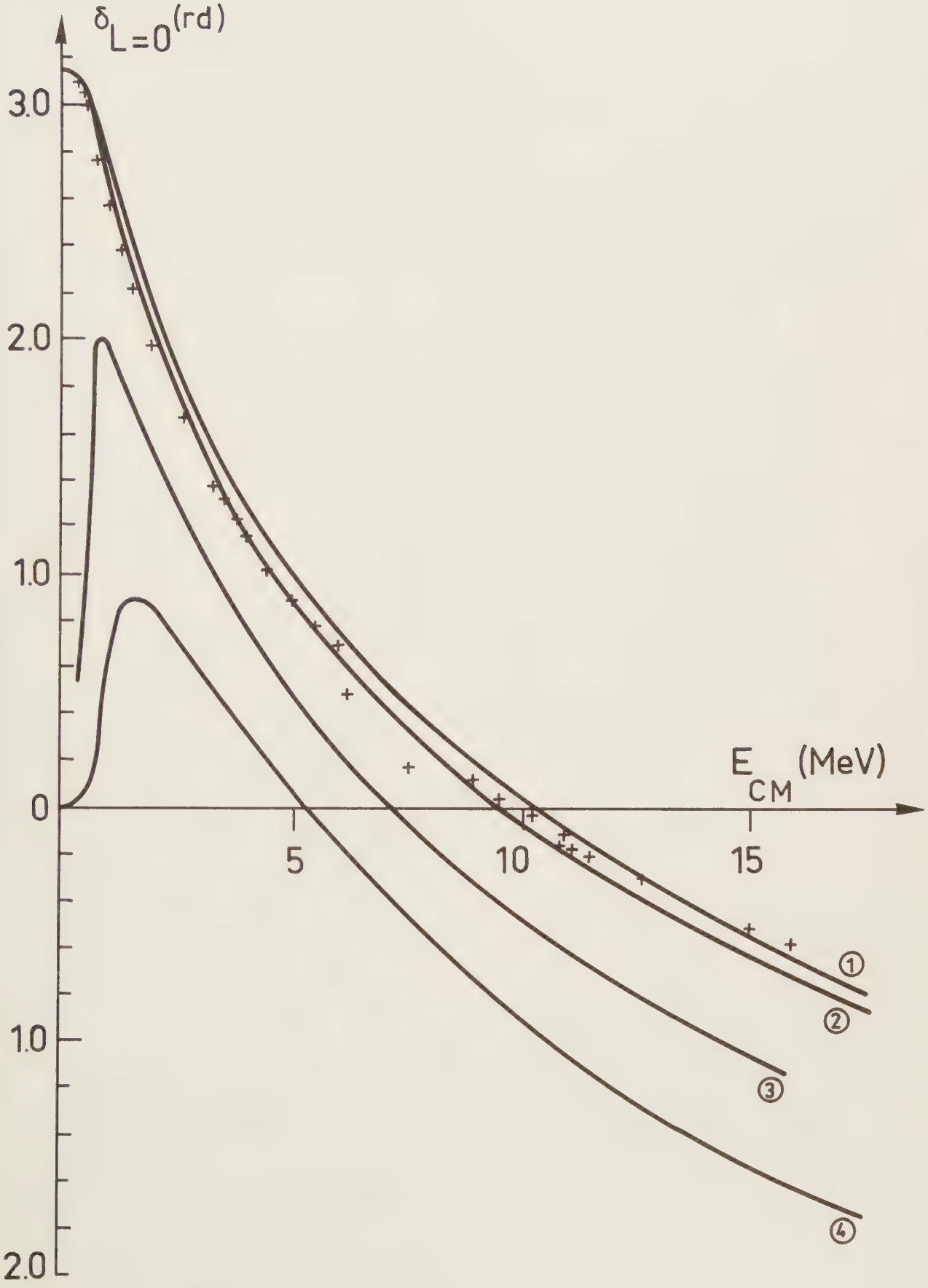



Fig. 5

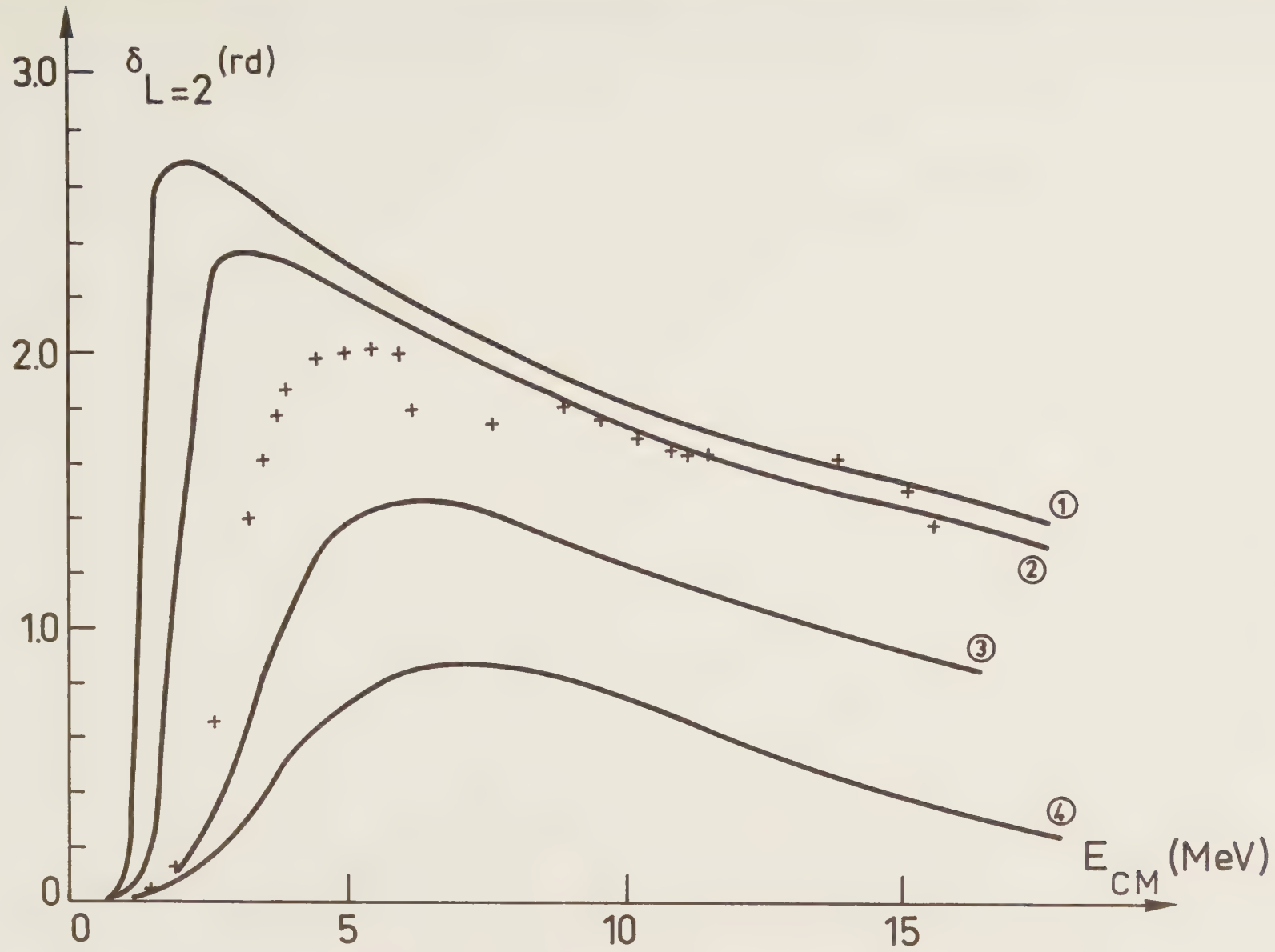



Fig. 6

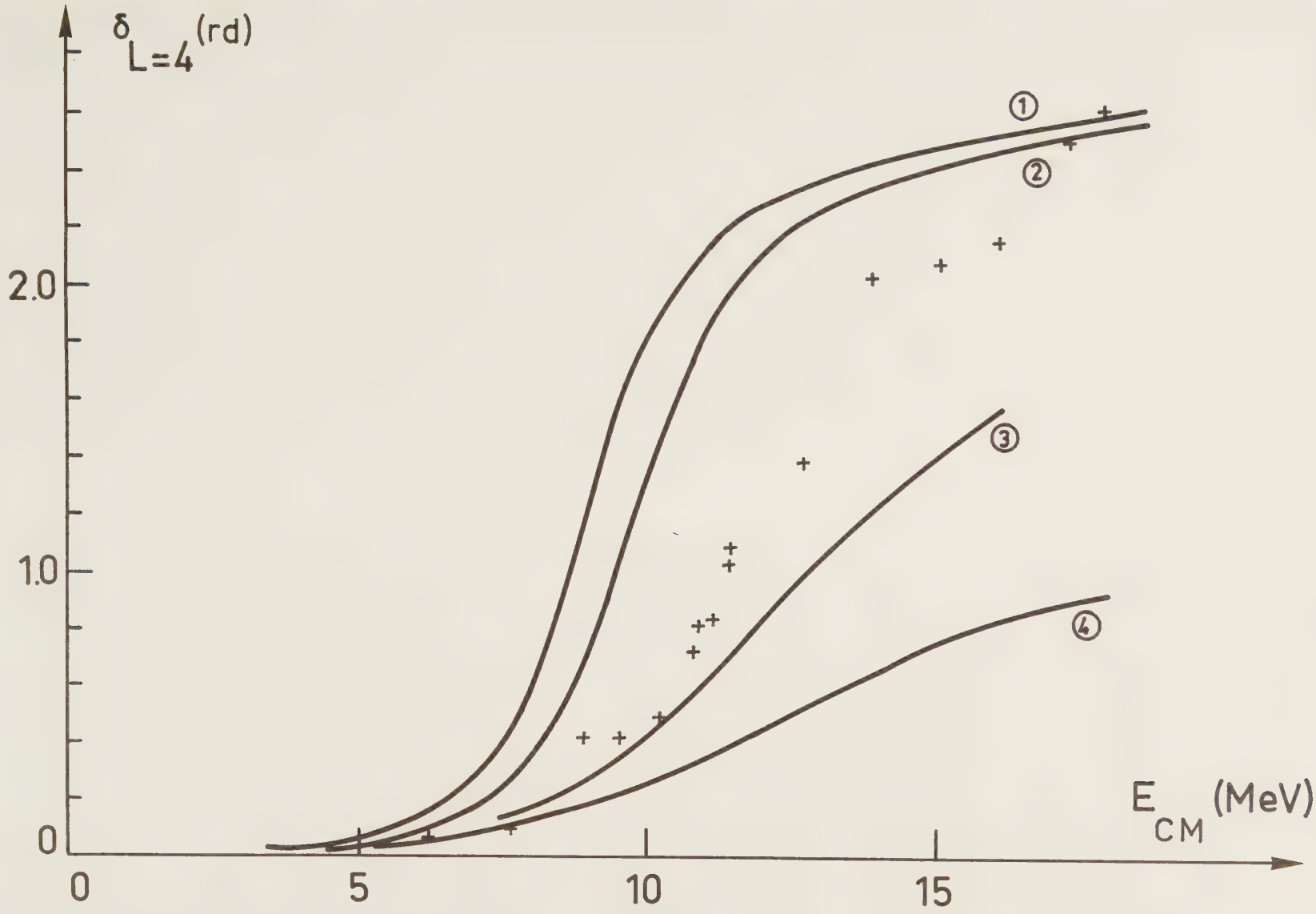



Fig. 7

## APPENDICE A

PHYSICAL REVIEW C VOLUME 10, NUMBER 4 OCTOBER 1974

# $\alpha$-$\alpha$ scattering in the generator-coordinate formalism

Albert Lumbroso
*Service de Physique Théorique, Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay, BP No 2 - 91190 Gif-sur-Yvette, France*
(Received 11 March 1974)

In the generator-coordinate formalism we calculate the phase shifts for $\alpha$-$\alpha$ scattering by solving the Hill-Wheeler equation in the continuum. The Pauli principle is exactly taken into account for the nuclear potential term. The Coulomb interaction is introduced under a long-range assumption. The results are compared to the experimental values.

[ NUCLEAR REACTIONS $\alpha$-$\alpha$ elastic scattering. Calculated phase shifts. ]

## I. INTRODUCTION

One can easily describe the ground state and the low-energy excited states of nuclei by use of the shell model. This model may then be refined by enlarging the configuration space in order to include particle-hole excitations. This procedure leads to large dimension problems, but the major objection is that our knowledge of the nucleon-nucleon force is still incomplete.

Other models are presented as alternatives to the shell model and in particular the $\alpha$-particle model. This model—in fact anterior to the shell model—was proposed in 1937 by Wefelmeier[1] and is founded on the exceptional stability of the $\alpha$ particles. Indeed, the $\alpha$ particles being very stable, one can assume that this stability persists when they are in groups in the nuclei, above all the light nuclei where the $LS$ scheme seems to be valid and is well adapted to a conservation of the $\alpha$ particles. For each light $N=Z$ nucleus whose mass is four times that of the nucleon mass, it is then possible to use the $\alpha$-particle model.

The generator coordinate method (GCM) is a very powerful tool for the study of this model. The method originated by Hill, Wheeler, and Griffin[2] for the purpose of fission has been successful in the study of nuclear rotations[3] and collective motion in the light nuclei.[4] Recent studies by Brink,[5] Brink and Weiguny,[6] and C. W. Wong[7] have revived the question, and the formalism has been extended to deal with scattering phenomena.[8] This extension which was done with the aid of a schematic model (dineutron) is taken up again here in the realistic case of $\alpha$-$\alpha$ elastic scattering. We have chosen this case on one hand for its simplicity because there are only two interacting fragments and, on the other hand, because a great deal of experimental work is available to test the consistency of the generator coordinate method.

Two problems arise when working with GCM: how to choose the generator coordinates and how to solve the equations obtained. In Sec. II briefly we describe the generator coordinate method and the choice of our generator coordinate while in Sec. III we show how to solve the Hill-Wheeler equation in the case of scattering. Finally, in Sec. IV we present and discuss the results obtained.

## II. GENERATOR COORDINATE METHOD APPLIED TO THE $\alpha$-$\alpha$ SYSTEM

In this section we follow the development given in Ref. (8). In order to simplify the calculations all the nucleons are assumed to move on the $0S$ orbitals of an harmonic oscillator and no deformation of the $\alpha$ particles during the collision is taken into account.

### A. Choice of base and Hill-Wheeler equation

In a collision problem, the relative distance between the interacting nuclei is the most important degree of freedom. This will fix our generator coordinate. Let us consider two $\alpha$ particles $(A)$ and $(B)$, centered a $+\frac{1}{2}\vec{r}$ and $-\frac{1}{2}\vec{r}$ with respect to an arbitrary origin 0. The coordinates (of space, spin, and isospin) of $(A)$ are labeled $r_1, r_2, r_3$, and $r_4$ with respect to this origin. Those of the nucleons of $(B)$ are labeled $r_5$, $r_6$, $r_7$, and $r_8$. The antisymmetrized wave function for the total system is thus written as

$$\Phi_{\vec{r}} = \mathcal{A}\{\varphi(r_1-\tfrac{1}{2}r)\varphi(r_2-\tfrac{1}{2}r)\varphi(r_3-\tfrac{1}{2}r)\varphi(r_4-\tfrac{1}{2}r) \times\varphi(r_5+\tfrac{1}{2}r)\varphi(r_6+\tfrac{1}{2}r)\varphi(r_7+\tfrac{1}{2}r)\varphi(r_8+\tfrac{1}{2}r)\} \quad (1)$$

with

$$\varphi(x) = \pi^{-3/4}b^{-3/2}\exp[-(\vec{x})^2/2b^2]\,\bar{\chi}_t\,\bar{\tau}_t\ ,$$

where $\mathcal{A}$ represents the antisymmetrization operator, $b$ the harmonic oscillator parameter, $\bar{\chi}_t$ and $\bar{\tau}_t$ the spin and isospin variables. The values taken on by $\chi_t$ and $\tau_t$ are $+\frac{1}{2}$ and $-\frac{1}{2}$.

In other words we represent the system of two

$\alpha$ particles by Slater determinants. But these determinants are not entirely satisfactory as they fix the mean positions of the centers of the clusters and consequently do not allow the true dynamical behavior of the structure to occur. Moreover, they are not eigenstates of the total angular momentum. One can obtain a more satisfactory wave function by taking linear combinations of all the Slater determinants, which, in the frame of the present problem, amounts to taking a coherent sum over all the positions that one can obtain by allowing $\vec{r}$ to vary.

The set of the base functions $\Phi_{\vec{r}}$ when $\vec{r}$ takes all the possible values generates the wave function

$$\psi = \int d\vec{r}\, f(\vec{r})\Phi_{\vec{r}} \,. \tag{2}$$

In this expression $f(\vec{r})$ is the amplitude of the mixing of configurations which depend on a continuous vector labeled $\vec{r}$. This amplitude is closely related to the scattering wave function. As we shall see presently the explicit determination of $f(\vec{r})$ is not necessary but this amplitude will lead us to the phase shifts describing the collision.

Let us call $\mathcal{H}$ the $N$-body Hamiltonian of the problem. The wave function $\psi$ is an approximate solution of the Schrödinger equation

$$\mathcal{H}\psi = E\psi \,. \tag{3}$$

One determines the best wave function $\psi$ possible by solving the Hill-Wheeler integral equation

$$\int [H(\vec{r},\vec{r}') - EN(\vec{r},\vec{r}')]f(\vec{r}')d\vec{r}' = 0 \,, \tag{4}$$

where

$$H(\vec{r},\vec{r}') = \langle \Phi_{\vec{r}'} | \mathcal{H} | \Phi_{\vec{r}} \rangle \tag{5a}$$

and

$$N(\vec{r},\vec{r}') = \langle \Phi_{\vec{r}'} | \Phi_{\vec{r}} \rangle \,. \tag{5b}$$

### B. Relation with the resonating group formalism

As originated by Wheeler,[9] the resonating group method (RGM) has been the starting point of $\alpha$-cluster model calculations. For a composite system one writes the total wave function as a combination of antisymmetrized partial wave functions corresponding to the different possibilities of the neutron and proton distributions in the composite system in groups such as dineutrons, $\alpha$ particles, lighter nuclei, etc. By using a variational procedure one determines the dependence of the total wave function with respect to the relative distances between the substructures, and this procedure leads to the resolution of an integro-differential equation.

The RGM is formally equivalent to the GCM.

Let us consider only the nonantisymmetrized spatial part of the base functions $\Phi_{\vec{r}}$:

$$\Phi_{\vec{r}} = \prod_{i=1}^{4} [\pi^{-3/4} b^{-3/2} e^{-(\vec{r}_i - \frac{1}{4}\vec{r})^2/2b^2}] \times \prod_{j=5}^{8} [\pi^{-3/4} b^{-3/2} e^{-(\vec{r}_j + \frac{1}{4}\vec{r})^2/2b^2}] \,, \tag{6}$$

we can express $\Phi_{\vec{r}}$ in the coordinate system where the center-of-mass coordinate, the relative coordinate, and the internal coordinates of the $\alpha$ particles appear.

By performing a change of coordinate in $\Phi_{\vec{r}}$, calling $\vec{R}_A = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} \vec{r}_i$ and $\vec{R}_B = \frac{1}{4}\sum_{j=5}^{8} \vec{r}_j$, the center of mass of the $\alpha$ particles $(A)$ and $(B)$, $\vec{R}_{\text{c.m.}} = \frac{1}{2}(\vec{R}_A + \vec{R}_B)$ the total center-of-mass coordinate, and $\vec{R} = \vec{R}_A - \vec{R}_B$ the relative coordinate, we obtain

$$\Phi_{\vec{r}} = [\pi^{-3/4}(b/2\sqrt{2})^{-3/2} e^{-4R_{\text{c.m.}}^2/b^2}] \times \Gamma(\vec{r},\vec{R})\psi_{\text{int}}(A)\psi_{\text{int}}(B) \,, \tag{7}$$

where $\psi_{\text{int}}(A)$ and $\psi_{\text{int}}(B)$ are the internal wave functions for the $\alpha$ clusters $(A)$ and $(B)$, and

$$\Gamma(\vec{r},\vec{R}) = \pi^{-3/4}(b/\sqrt{2})^{-3/2} \exp[-(\vec{r}-\vec{R})^2/b^2] \,. \tag{8}$$

We notice that the center-of-mass motion is factorized. Since the formalism is invariant by Galilean transformation, we shall ignore this center-of-mass motion in the remainder of the discussion. By inserting Eq. (7) in Eq. (2) the $\alpha$-$\alpha$ system wave function now reads

$$\psi = \mathcal{A}\psi_{\text{int}}(A)\psi_{\text{int}}(B)g(\vec{R}) \,, \tag{9}$$

where

$$g(\vec{R}) = \pi^{-3/4}(b/\sqrt{2})^{-3/2} \int \exp[-(\vec{r}-\vec{R})^2/b^2] f(\vec{r})d\vec{r} \,. \tag{10}$$

The expression given in Eq. (9) is precisely the expression of the wave function used in the resonating group method where the unknown function is $g(R)$. As Eq. (9) also represents the wave function used in GCM where the unknown function is $f(\vec{r})$, the connection between the two methods becomes evident and we may write the fundamental Eq. (10) formally

$$g = \Gamma \otimes f \,, \tag{10'}$$

where the symbol $\otimes$ denotes a convolution product.

### C. Hill-Wheeler equation in coordinate space

It is easier to obtain the kernels of the Hill-Wheeler integral if one expresses $\Phi_{\vec{r}}$ [Eq. (1)] in

second quantization:

$$|\Phi_{\bar{r}}\rangle = a_p^\dagger(\tfrac{1}{2}\bar{r})a_{\bar{p}}^\dagger(\tfrac{1}{2}\bar{r})a_p^\dagger(-\tfrac{1}{2}\bar{r})a_{\bar{p}}^\dagger(-\tfrac{1}{2}\bar{r})a_n^\dagger(\tfrac{1}{2}\bar{r})a_{\bar{n}}^\dagger(\tfrac{1}{2}\bar{r})a_n^\dagger(-\tfrac{1}{2}\bar{r})a_{\bar{n}}^\dagger(-\tfrac{1}{2}\bar{r})|0\rangle\,, \tag{11}$$

where $|0\rangle$ represents the vacuum, $a_p^\dagger$ ($a_{\bar{p}}^\dagger$) the creation operator for a proton of spin $+\frac{1}{2}$ ($-\frac{1}{2}$) and $a_n^\dagger$ ($a_{\bar{n}}^\dagger$) the creation operator for a neutron of spin $+\frac{1}{2}$ ($-\frac{1}{2}$). These operators obey ordinary commutation rules and allow the use of the Lowdin's technique.[10]

The Hamiltonian $\mathcal{H}$ of the system contains: (a) The kinetic energy of all the nucleons

$$\mathcal{T} = \sum_{i=1}^{A}\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\bar{\nabla}_i\right],$$

where $M$ is the nucleon mass; (b) a two body potential energy term of general form

$$v_{ij} = V_0 e^{-(\bar{r}_i-\bar{r}_j)^2/\mu^2}(A + BP_\sigma + CP_\tau + DP_\sigma P_\tau)\,, \tag{12}$$

where $V_0$ represents the depth and $\mu$ the range of the potential, $P_\sigma$ and $P_\tau$ are the spin and isospin exchange operators, and $A$, $B$, $C$, and $D$ are the coefficients of the mixture; (c) a Coulomb interaction term which is discussed in Sec. III F. We can now calculate the quantities useful for the problem. For the overlap $N(\bar{r},\bar{r}')$ we obtain

$$N(\bar{r},\bar{r}') = \{\exp[-(\bar{r}-\bar{r}')^2/8b^2] - \exp[-(\bar{r}+\bar{r}')^2/8b^2]\}^4. \tag{13}$$

Asymptotically ($r$ or $r'$ large) we notice that

$$N \approx \Gamma \otimes \Gamma\,,$$

where $\Gamma$ is the operator defined by Eq. (8). This result will be used later.

The interesting quantity in our problem is the relative energy between the $\alpha$ particles. We must therefore take into account (i) the kinetic energy of the center-of-mass motion $T_{\text{c.m.}} = 3\hbar\omega/4$, (ii) the internal kinetic energy of each $\alpha$ cluster $T_{\text{int}} = 3(3\hbar\omega/4)$ where $\hbar\omega = \hbar^2/Mb^2$, and (iii) the internal potential energy of the two $\alpha$ particles,

$$V_{\text{int}} = \frac{4\mu^3(S-G)V_0}{(2b^2+\mu^2)^{3/2}}N(\bar{r},\bar{r}')\,.$$

Once we have subtracted

$$(2T_{\text{int}} + T_{\text{c.m.}} + V_{\text{int}})N(\bar{r},\bar{r}')$$

from $H(\bar{r},\bar{r}')$, we get the kernel of a Hill-Wheeler equation related to the relative motion of two $\alpha$ particles of relative kinetic energy at infinity:

$$\hbar^2k^2/2m,$$

where $m = 2M$ is the reduced mass, and the wave number $\bar{k}$ is the asymptotic wave number of the relative motion. Hence we obtain a kinetic and a potential energy kernel

$$T(\bar{r},\bar{r}') = \hbar\omega\left(\left(\frac{3}{4} - \frac{r^2+r'^2}{4b^2}\right)N(\bar{r},\bar{r}') + N^{3/4}(\bar{r},\bar{r}')\cdot\frac{\bar{r}\bar{r}'}{2b^2}\cdot\left\{\exp\left[-\frac{(\bar{r}-\bar{r}')^2}{8b^2}\right] + \exp\left[-\frac{(\bar{r}+\bar{r}')^2}{8b^2}\right]\right\}\right), \tag{14}$$

$$\begin{aligned} V(\bar{r},\bar{r}') = {} & \frac{4V_0\mu^3}{(2b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left(-\frac{r^2+r'^2}{2b^2}\right)\left[\exp\left(\frac{\bar{r}\bar{r}'}{2b^2}\right) + \exp\left(-\frac{\bar{r}\bar{r}'}{2b^2}\right) - 2\right] \\ & \times\left(2(G-S)\left\{\exp\left[-\frac{r^2}{4(2b^2+\mu^2)}\right] + \exp\left[-\frac{r'^2}{4(2b^2+\mu^2)}\right] - 1\right\}\right. \\ & \left. - \exp\left[-\frac{(\bar{r}+\bar{r}')^2}{4(2b^2+\mu^2)}\right]\left[G - S\exp\left(\frac{\bar{r}\bar{r}'}{2b^2}\right)\right] - \exp\left[-\frac{(\bar{r}-\bar{r}')^2}{4(2b^2+\mu^2)}\right]\left[G - S\exp\left(-\frac{\bar{r}\bar{r}'}{2b^2}\right)\right]\right) \end{aligned} \tag{15}$$

with $G = A + 2B + 2C + 4D$ and $S = 4A + 2B + 2C + D$.

## III. RESOLUTION OF HILL-WHEELER EQUATION

### A. Difficulties in solving the equation in coordinate space

We write Eq. (4) in operator form:

$$(H - EN)f = 0\,.$$

We can reduce it to a diagonalization problem by multiplying it on the left by $N^{-1/2}$ (provided $N^{-1/2}$ exists)

$$(N^{-1/2}HN^{-1/2} - E)(N^{1/2}f) = 0\,,$$

and solve this eigenvalue problem for an integration mesh $q_i$, correctly chosen.

There is, however, a problem which renders the use of this method difficult: the values obtained at the points $q_i$ do not generate a stable function $f(q_i)$ when we change the integration

mesh. The closer the points, the more violently the function $f(q_i)$ oscillates. These oscillations can be explained if we look at $\Gamma(\bar{q}, \bar{q}')$, the Fourier transform of $\Gamma(\bar{r}, \bar{R})$ defined at Eq. (8):

$$\Gamma(\bar{q}, \bar{q}') = (2\pi)^{3/4} b^{3/2} e^{-b^2 q^2/4} [\delta(\bar{q} - \bar{q}') + \delta(\bar{q} + \bar{q}')] \tag{16}$$

which, when we call $f(\bar{q})$ and $g(\bar{q})$ the Fourier transforms of $f(\bar{r})$ and $g(\bar{r})$, leads to

$$f(\bar{q}) = (2\pi)^{-3/4} b^{-3/2} e^{b^2 q^2/2} g(\bar{q}) \ . \tag{17}$$

The function $g(\bar{q})$ is a scattering function which decreases to 0 when $q$ tends to infinity. However, this decrease is not in general fast enough to compensate for the quadratic exponential which figures in Eq. (17). Consequently, the inverse Fourier transform which leads from $f(\bar{q})$ to $f(\bar{r})$ diverges at high frequency and this explains the violent oscillations of $f(\bar{r})$ when the mesh points become closer.

### B. Representation in momentum space

For solving the Hill-Wheeler equation for the continuous spectrum it is convenient to take $g$ as the unknown function obeying the equation

$$\Gamma^{-1}(H - EN)\Gamma^{-1} g = 0 \tag{18}$$

and to solve it in momentum space.

We shall see later that this equation is a Schrödinger equation or more exactly a Lippmann-Schwinger equation, as it is solved in momentum space representation. As a matter of fact, the inversion of $\Gamma$ in coordinate space is not an operation as easy as it is in momentum space. However, the divergence of $\Gamma^{-1}$ at high frequency is compensated by the fast exponential decrease of the kernels $N$, $T$, and $V$ as one can see on the Fourier transforms

$$N(\bar{q}, \bar{q}') = (2\pi)^{3/2} b^3 \exp(-\tfrac{1}{2} b^2 q^2)[\delta(\bar{q} - \bar{q}') + \delta(\bar{q} + \bar{q}')] + 6b^6 \exp[-\tfrac{1}{2} b^2 (q^2 + q'^2)]$$
$$- \frac{32}{3^{3/2}} b^6 \exp\left[-\frac{2b^2}{3}(q^2 + q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right) + \exp\left(-\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right)\right], \tag{19}$$

$$T(\bar{q}, \bar{q}') = \hbar\omega\Big\{(2\pi)^{3/2} \tfrac{1}{4} b^5 q^2 \exp[-\tfrac{1}{2} b^2 q^2][\delta(\bar{q} + \bar{q}') + \delta(\bar{q} - \bar{q}')] - \tfrac{3}{2} b^6 \exp[-\tfrac{1}{2} b^2 (q^2 + q'^2)][3 - b^2(q^2 + q'^2)]$$
$$+ \frac{2^3}{3^{3/2}} b^6 \exp\left[-\frac{2b^2}{3}(q^2 + q'^2 + \bar{q}\bar{q}')\right]\left[3 - \frac{4b^2}{3}(q^2 + q'^2 + \bar{q}\bar{q}')\right]$$
$$+ \frac{2^3}{3^{3/2}} b^6 \exp\left[-\frac{2b^2}{3}(q^2 + q'^2 - \bar{q}\bar{q}')\right]\left[3 - \frac{4b^2}{3}(q^2 + q'^2 - \bar{q}\bar{q}')\right]\Big\}. \tag{20}$$

The corresponding expression for $V(\bar{q}, \bar{q}')$ is easily obtained. As it is rather cumbersome, we present it in Appendix A [Eq. (A1)].

### C. Treatment of the divergences

After the application of the operator $\Gamma^{-1}(\bar{q}, \bar{q}')$ no exponential divergences remain in the kernels $n = \Gamma^{-1} N \Gamma^{-1}$, $t = \Gamma^{-1} T \Gamma^{-1}$, and $v = \Gamma^{-1} V \Gamma^{-1}$. One finds for $n$ and $t$ [the corresponding formula for $v$ is given in Appendix A, Eq. (A2)]:

$$n(\bar{q}, \bar{q}') = \tfrac{1}{2}[\delta(\bar{q} + \bar{q}') + \delta(\bar{q} - \bar{q}')] + \frac{3b^3}{(2\pi)^{3/2}} \exp[-\tfrac{1}{4} b^2 (q^2 + q'^2)]$$
$$- \frac{16 b^3}{3^{3/2}(2\pi)^{3/2}} \exp\left[-\frac{5b^2}{12}(q^2 + q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right) + \exp\left(-\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right)\right], \tag{21}$$

$$t(\bar{q}, \bar{q}') = \tfrac{1}{8}(\hbar\omega b^2) q^2 [\delta(\bar{q} - \bar{q}') + \delta(\bar{q} + \bar{q}')]$$
$$+ \frac{\hbar\omega}{(2\pi)^{3/2}}\Big(-\tfrac{3}{4} b^3 \exp[-\tfrac{1}{4} b^2 (q^2 + q'^2)][3 - b^2(q^2 + q'^2)]$$
$$+ \frac{4b^3}{3^{3/2}} \exp\left[-\frac{5b^2}{12}(q^2 + q'^2)\right]\Big\{\left[3 - \frac{4b^2}{3}(q^2 + q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right) + \exp\left(-\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right)\right]$$
$$+ \frac{4b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\left[\exp\left(\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right) - \exp\left(-\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right)\right]\Big\}\Big). \tag{22}$$

### D. Projection onto even waves

It now remains to project $n$, $t$, and $v$ onto even waves, as the Pauli principle excludes the odd waves. Denoting $l$ the partial wave index, we find

$$n_l(q,q') = \frac{\delta(q-q')}{q^2} + \nu_l(q,q') , \tag{23}$$

$$\nu_l(q,q') = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left\{ 3\sqrt{2}\, b^3 \exp\left[-\frac{b^2}{4}(q^2+q'^2)\right]\delta_{l,0} - \frac{32\sqrt{2}\,b^3}{3^{3/2}} \exp\left[-\frac{5b^2}{12}(q^2+q'^2)\right] i_l\left(\frac{2b^2}{3} q q'\right)\right\} , \tag{24}$$

$$t_l(q,q') = \frac{\hbar^2}{4M}\,\delta(q-q') + \theta_l(q,q') , \tag{25}$$

$$\theta_l(q,q') = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{M} \left( -\frac{9b}{4} \exp\left[-\frac{b^2}{4}(q^2+q'^2)\right]\delta_{l,0} + \frac{3b^3}{4}(q^2+q'^2)\exp\left[-\frac{b^2}{4}(q^2+q'^2)\right]\delta_{l,0} \right.$$
$$+ \frac{4b}{3^{3/2}} \exp\left[\frac{5b^2}{12}(q^2+q'^2)\right] \left\{ \left[6 - \frac{8b^2}{3}(q^2+q'^2)\right] i_l\left(\frac{2b^2}{3} qq'\right) \right.$$
$$\left. \left. + \frac{8b^2}{3(2l+1)}\, qq' \left[ l\, i_{l-1}\left(\frac{2b^2}{3} qq'\right) + (l+1) i_{l+1}\left(\frac{2b^2}{3} qq'\right)\right]\right\}\right) , \tag{26}$$

where $i_l(x)$ represents the modified spherical Bessel function.

The equivalent expression for $v_l(q,q')$ is given in Appendix A [Eq. (A3)]. Since the phase space in partial waves is $q^2dq$, the equation

$$(t_l + v_l - En_l)g_l$$

contains in particular a term $(q^2-E)g_l(q)$ which is nothing but the characteristic term of a Lippmann-Schwinger equation. This justifies what has previously been stated about the reduction of a Hill-Wheeler equation to a Schrödinger equation.

### E. Role of the Pauli principle

Not only are the odd waves not present in the system, as the $\alpha$ particles behave as bosons at long range, but, moreover, it is well known that at short range the Pauli principle imposes a change of four $S$ orbits in $P$ orbits (see Ref. 5).

The result is that the relative motion $g_l(q)$ or $g_l(r)$ in the $S$ wave cannot contain any component on the $0S$ and $1S$ wave. In the same way, the relative motion in the $D$ wave cannot contain any component on the $0D$ wave. In fact, due to the numerical approximations that we shall allow, some spurious mixing of these $0S$, $1S$, and $1D$ states can be present. Since they do not change the wave function at long range, they do not change in principle the phase shifts. We shall verify after calculations that the numerical solutions are not perturbed by the eventual presence of these spurious components.

### F. Treatment of the Coulomb interaction

For the Coulomb interaction we make an approximation related to the longe range of this potential. In fact, when the two $\alpha$ particles are far enough from each other, that is to say when the Pauli principle does not play an important role, the leading terms are those of the direct term and total exchange term.

We directly introduce the Coulomb potential in momentum representation. For this purpose we restrict ourselves for the moment to the case of the Coulomb potential $v_c = z^2e^2/R$. Following, for instance, Ref. 11 we write

$$Eg(\vec{q}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\, g(\vec{q}) + \int v_c(\vec{q}-\vec{q}')g(\vec{q}')d\vec{q}' , \tag{27}$$

$$v_c(\vec{q}-\vec{q}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{R}} v_c(\vec{R})d\vec{R} ,$$

which after projection on partial waves leads to

$$(k^2-q^2)g_l(q) = \frac{2}{\pi}\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty I_l(q,q')q'^2 g_l(q')dq' \tag{28}$$

and

$$I_l(q,q') = \int_0^\infty j_l(qR) j_l(q'R) v_c(R) R^2 dR , \tag{29}$$

where $j_l(x)$ is the spherical Bessel function of order $l$.

There is no closed formula for the integral $I_l(q,q')$ if $v_c(R)$ is truncated, and this will be the case. Due to the presence of the Bessel functions it cannot be calculated by general integration methods. In order to obtain it numerically we establish in Appendix B some of its properties and in particular a recursion formula which $I_l(q,q')$ obeys.

We now come back to the complete equation

which contains the Coulomb term as well as the other terms deduced above from the transformation of the Hill-Wheeler equation:

$$(k^2 - q^2)g_l(q) = \frac{4M}{\hbar^2} \int_0^\infty W_l(q, q')g_l(q')q'^2 dq' . \tag{30}$$

It looks like a Fredholm equation for the kernel

$$W_l(q, q') = \theta_l(q, q') + v_l(q, q') - Ev_l(q, q') + \frac{2}{\pi} I_l(q, q') , \tag{31}$$

which plays the role of a nonlocal pseudopotential.

### G. Method for calculating the phase shifts

We are only interested in the phase shifts generated by the equation shown above. To calculate the phase shifts we have thus chosen the Fredholm method as it was developed by Schwinger[12] and Baker.[13] The determinant $D(z) = \det[1 - G^0(z)W]$, where $G^0(z) = (z - T)^{-1}$, is the Green function of the free particle, and contains all the information about the scattering. For a given partial wave $l$, the phase shift then reads:

$$\tan \delta_l(E) = -\frac{\mathrm{Im}[D_l(E + i\epsilon)]}{\mathrm{Re}[D_l(E + i\epsilon)]} . \tag{32}$$

By using the identity between operators

$$\det A = \exp \mathrm{tr} \ln A \tag{33}$$

we obtain the following development for $D_l(z)$:

$$D_l(z) = 1 - \int_0^\infty \frac{dE_1 W_{11}^l}{z - E_1} + \frac{1}{2!} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dE_1 dE_2}{(z - E_1)(z - E_2)} \begin{vmatrix} W_{11}^l & W_{12}^l \\ W_{21}^l & W_{22}^l \end{vmatrix} + \dots , \tag{34}$$

where the $W_{ij}$ are the matrix elements of the pseudopotential (31) in energy representation. In our case we only have to calculate the integral of $(qq')^{1/2} W_l(q, q')$ to return to momentum representation.

When we calculate within $\mathrm{Im}[D_l(z)]$ and $\mathrm{Re}[D_l(z)]$ the integrals (which are principal part values) by use of an $N$-point $q_i$ Gauss-Legendre quadrature method, we obtain the following expressions, in which $\omega_i$ represents the weights associated with the $q_i$ points:

$$\mathrm{Im}[D_l(E + i\epsilon)] = -\pi \begin{vmatrix} -W_{00}^l & -\frac{2W_{01}^l \omega_1 q_1}{k^2 - q_1^2} \dots -\frac{2W_{0N}\omega_N q_N}{k^2 - q_N^2} \\ \cdot & \\ \cdot & \mathrm{Re}[D_l(E + i\epsilon)] \\ \cdot & \\ -W_{N0}^l & \end{vmatrix} , \tag{35a}$$

$$\mathrm{Re}[D_l(E + i\epsilon)] = \begin{vmatrix} 1 - \frac{2W_{11}^l \omega_1 q_1}{k^2 - q_1^2} & -\frac{2W_{22}^l \omega_2 q_2}{k^2 - q_2^2} & \dots -\frac{2W_{1N}^l \omega_N q_N}{k^2 - q_N^2} \\ -\frac{2W_{21}^l \omega_1 q_1}{k^2 - q_1^2} & 1 - \frac{2W_{22}^l \omega_2 q_2}{k^2 - q^2} & \dots \\ \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \\ \frac{2W_{N1}^l \omega_1 q_1}{k^2 - q_1^2} & \dots & \frac{2W_{NN}^l \omega_N q_N}{k^2 - q_N^2} \end{vmatrix} . \tag{35b}$$

The Fredholm method has already been employed in particular by Jost and Pais[14] and by Reinhardt and Szabo[15] for calculations on phase shifts of a particle by a potential.

## IV. RESULTS AND DISCUSSION

### A. Parameters of the problem

One of the aspects of this problem lies in the general absence of parametrization. The only numerical constants present are the value of the harmonic oscillator parameter which is related to the $\alpha$-particle radius, and the mixture defining a nucleon-nucleon force.

*Harmonic oscillator parameter.* This parameter is obtained from the r.m.s. radius of an $\alpha$ particle of which the center of mass is fixed:

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \frac{\int x^4 \rho(x) dx}{\int x^2 \rho(x) dx} = \frac{9}{8} b^2 , \tag{36}$$

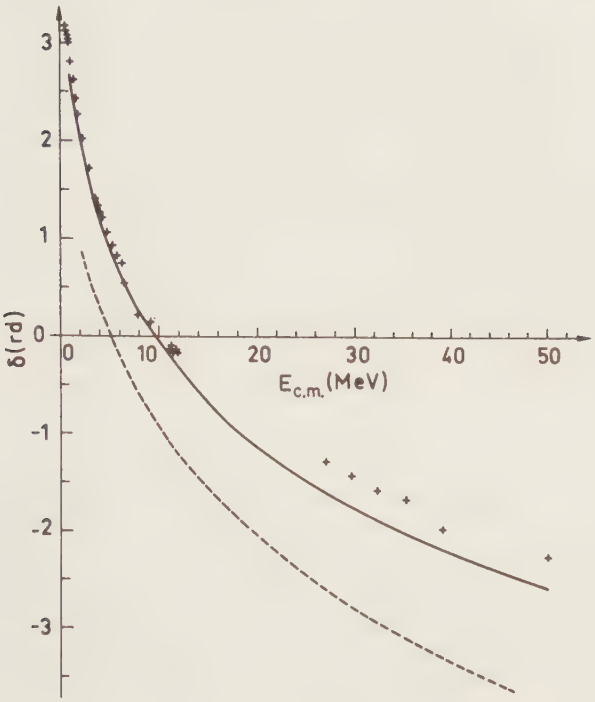



FIG. 1. The $l=0$ phase shift. The full line curve represents the values obtained with the Volkov potential [Eq. (37)], the dashed curve represents the values obtained with the Brink $B1$ potential [Eq. (38)]. The experimental points (+) are those listed in Ref. 16.

where

$$\rho(x)=\int \prod_{i=1}^{4}(dx_i\,|\,e^{-x_1^2/2b^2}\,|^2)\,\delta(\bar{x}-\bar{x}_1)\,\delta\left(\sum_{j=1}^{4}\bar{x}_j\right).$$

This leads to $b=1.36$ fm for the value[16] $x_\alpha=1.44$ fm of the $\alpha$-particle radius.

*Two-body potential.* We have used the soft repulsive core potentials of Volkov[17]

$$V(x)=(0.44+0.56P_x)(-60\,e^{-(x/1.80)^2}+60\,e^{-(x/1.01)^2}) \tag{37}$$

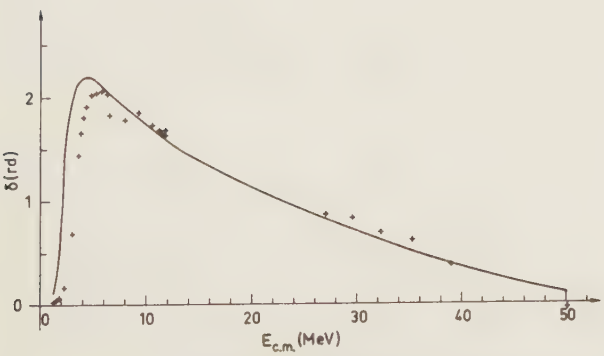



FIG. 2. The $l=2$ phase shift obtained with the Volkov potential. The experimental points (+) are those listed in Ref. 16.

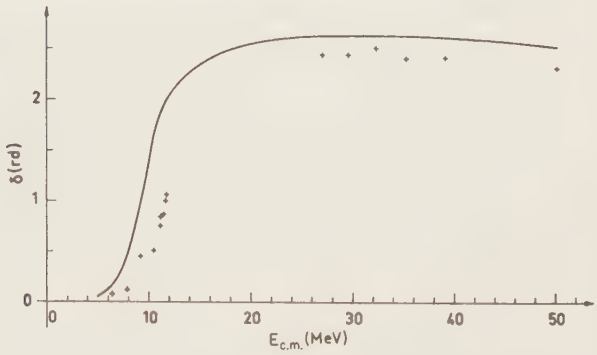



FIG. 3. The $l=4$ phase shift obtained with the Volkov potential. The experimental points (+) are those listed in Ref. 16.

and of Brink and Boeker[18] $B_1$

$$V(x)=-140.6\,e^{-(x/1.4)^2}(0.51+0.49P_x)$$
$$+389.5\,e^{-(x/0.7)^2}(1.53-0.53P_x)\,. \tag{38}$$

*Coulomb potential.* The determinantal method described above holds only if the radial part of the potentials tends to 0 faster than $1/r$ when $r\to\infty$. We have adopted the truncated Coulomb potential

$$v_c(R)=z^2e^2/R \quad \text{if } R\leq R_0\,, \qquad =0 \quad \text{if } R>R_0\,. \tag{39}$$

We replace, after $R_0$, the Coulomb potential by the correction

$$\gamma\ln(2kR_0)\,,$$

where

$$\gamma=z^2e^2/\hbar v$$

and $v$ is the velocity of the incident particle.

We choose $R_0=30$ fm and we have checked that the Coulomb phase shifts $\sigma_l$ obtained by resolution of the equations containing only the Coulomb term

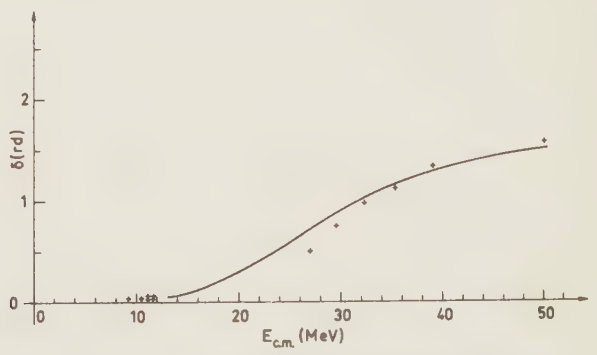



FIG. 4. The $l=6$ phase shift obtained with the Volkov potential. The experimental points (+) are those listed in Ref. 16.

gives the well-known result

$$\sigma_l = \Gamma(l+1+i\gamma), \tag{40}$$

where $\Gamma$ represents here the Euler function and $l$ is the $l$th partial wave.

Finally, in order to take into account the gross features of the exchange effects, we have also replaced the expression given in Eq. (39) by the following one:

$$\begin{aligned} v_c(R) &= \frac{z^2e^2}{2R}\left(3-\frac{R^2}{x_\alpha{}^2}\right) \quad 0 \le R \le 2x_\alpha, \\ &= \frac{z^2e^2}{R} \quad 2x_\alpha < R \le R_0, \\ &= 0 \quad R > R_0. \end{aligned} \tag{41}$$

The results for the $\delta_l$ phase shifts have not been significantly modified.

*Integration mesh.* We use a Gauss-Legendre method in order to perform the integrals in the determinants defined in Eqs. (35a) and (35b). The mesh is the following: a 12 point method between 0 and 1 fm, a 12 point method between 1 and 2 fm, and an 8 point method between 2 and 30 fm.[19]

We have also used a 32 point method preceded by the change of variable

$$q_i = k\tan[\tfrac{1}{4}\pi(1+x_i)],$$

the $x_i$ denoting the Gauss-Legendre points. The two methods give the same results.

### B. Results

We have represented in Fig. 1 the results of the phase shifts obtained for the $S$ wave with a Volkov [Eq. (37)] and Brink $B1$ [Eq. (38)] interaction. Both the two forces give correct results but the Volkov one is closer to the experimental results. We have also used all the other $B$ and $C$ forces listed in the Brink and Boeker[18] paper. All the results are distributed around $B1$ and are not shown here. In Figs. 2, 3, and 4 are given the $l=2$, 4, and 6 phase shifts, respectively. The agreement with experiment is rather good.

The same results have already been reported by several authors, namely Okai and Park[20] and Federsel *et al.*,[21] by use of the resonating group method. All these calculations show the equivalence between the RGM and GCM. The flexibility of the GCM in particular could be useful to calculate an effective $\alpha$-$\alpha$ potential.

There is, however, another method due to de Takacsy[22] to obtain the phase shifts. Essentially in this method the Hill-Wheeler integral is solved in coordinate space and the integral from 0 to $\infty$ is replaced by an integral from 0 to an arbitrary cutoff $S_0$. The part from $S_0$ to infinity of the integral is replaced by something else where the unknown function $f(r)$ is replaced by the asymptotic scattering function. de Takacsy with less integration points shows nuclear phase shifts.

The drawback of this method is that this arbitrary cutoff in the Hill-Wheeler integral introduces an additional parameter, and there is no proof that if $S_0$ is increased the solution remains stable. This objection has already been pointed out by Horiuchi[23] in his calculations in coordinate space, since he was obliged to define for each partial wave a different "channel radius" in order to fit the experimental results.

To conclude, we note that our microscopic theory is free of parametrization. Except for the Coulomb interaction, the Pauli principle is correctly taken into account and the Coulomb force is introduced without use of the usual parametrizations, leading to a rather good description of $\alpha$-$\alpha$ scattering. This theory could be extended to heavier nuclei such as $^{16}$O-$^{16}$O or $^{16}$O-$^{12}$C scattering, but then requires some additional approximations.


## ACKNOWLEDGMENTS

The author wishes to express his gratitude to Dr. B. Giraud for suggesting this problem to him, and to Dr. J. C. Hocquenghem for very helpful discussions. Thanks are also due Dr. C. Mahaux for a critical reading of the manuscript.


## APPENDIX A: DIFFERENT EXPRESSIONS FOR THE NUCLEAR POTENTIAL TERM

### A. Fourier transform of $V(\vec{r},\vec{r}')$

$$\begin{aligned} V(\vec{q},\vec{q}') = 16\mu^3 b^6 V_0 (G-S) &\left(-\frac{4}{3^{3/2}(2b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{2b^2}{3}(q^2+q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{2b^2}{3}\vec{q}\vec{q}'\right)+\exp\left(-\frac{2b^2}{3}\vec{q}\vec{q}'\right)\right]\right. \\ &+\frac{4}{(8b^2+3\mu^2)^{3/2}}\left\{\exp\left[-\frac{(5b^2+2\mu^2)b^2q'^2+(4b^2+2\mu^2)b^2q^2}{8b^2+3\mu^2}\right]\right. \\ &\left.\left.+\exp\left[-\frac{(5b^2+2\mu^2)b^2q^2+(4b^2+2\mu^2)b^2q'^2}{8b^2+3\mu^2}\right]\right\} \\ &\times\left\{\exp\left[\frac{(4b^2+2\mu^2)b^2\vec{q}\vec{q}'}{8b^2+3\mu^2}\right]+\exp\left[-\frac{(4b^2+2\mu^2)b^2\vec{q}\vec{q}'}{8b^2+3\mu^2}\right]\right\} \end{aligned}$$

$$-\frac{2^{3/2}}{(5b^2+2\mu^2)^{3/2}}\left[\exp\left(-\frac{b^2q^2}{2}\right)\exp\left(-\frac{2b^2+\mu^2}{5b^2+2\mu^2}b^2q'^2\right)\right.$$

$$\left.+\exp\left(-\frac{b^2q'^2}{2}\right)\exp\left(-\frac{2b^2+\mu^2}{5b^2+2\mu^2}b^2q^2\right)\right]+\frac{1}{(2b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{2}(q^2+q'^2)\right]\Bigg)$$

$$-32\mu^3b^6V_0(G+2S)\frac{1}{(12b^2+3\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2(5b^2+2\mu^2)(q^2+q'^2)}{12b^2+3\mu^2}\right]$$

$$\times\left[\exp\left(\frac{2b^2+2\mu^2}{12b^2+3\mu^2}b^2\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{2b^2+2\mu^2}{12b^2+3\mu^2}b^2\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right]$$

$$+4\mu^3b^6V_0(S+2G)\frac{1}{(3b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2(5b^2+2\mu^2)}{12b^2+4\mu^2}(q^2+q'^2)\right]$$

$$\times\left[\exp\left(\frac{b^2}{6b^2+2\mu^2}b^2\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{b^2}{6b^2+2\mu^2}b^2\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right]$$

$$-32\mu^3b^6V_0G\frac{1}{(8b^2+3\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2(5b^2+2\mu^2)}{8b^2+3\mu^2}(q^2+q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{6b^2+2\mu^2}{8b^2+3\mu^2}b^2\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{6b^2+2\mu^2}{8b^2+3\mu^2}b^2\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right]$$

$$+4\mu^3b^6V_0S\frac{1}{(2b^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{5b^2+2\mu^2}{8}(q^2+q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{3b^2+2\mu^2}{4}\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{3b^2+2\mu^2}{4}\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right],$$

with $G=A+2B+2C+4D$ and $S=4A+2B+2C+D$. **(A1)**

### B. Treatment of the divergences

$$v(\bar{q},\bar{q}')=\frac{8\mu^3b^3V_0(G-S)}{(2\pi)^{3/2}}\Bigg\{\frac{4}{(8b^2+3\mu^2)^{3/2}}\left[\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{12b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}q'^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{8b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}q^2\right)\right.$$

$$\left.+\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{12b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}q^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{8b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}q'^2\right)\right]$$

$$\times\left[\exp\left(\frac{2b^2(2b^2+\mu^2)}{8b^2+3\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{2b^2(2b^2+\mu^2)}{8b^2+3\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right]$$

$$-\frac{2^{3/2}}{(5b^2+2\mu^2)^{3/2}}\left[\exp\left(-\frac{b^2}{4}q^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{3b^2+2\mu^2}{5b^2+2\mu^2}q'^2\right)\right.$$

$$\left.+\exp\left(-\frac{b^2}{4}q'^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{3b^2+2\mu^2}{5b^2+2\mu^2}q^2\right)\right]$$

$$-\frac{4}{3^{3/2}(2b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{5b^2}{12}(q^2+q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{2b^2}{3}\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{2b^2}{3}\bar{q}\bar{q}'\right)\right]$$

$$\left.+\frac{1}{(2b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{4}(q^2+q'^2)\right]\right\}$$

$$-\frac{16\mu^3b^3V_0(G+2S)}{(2\pi)^{3/2}}\frac{1}{3^{3/2}(4b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{12}\,\frac{8b^2+5\mu^2}{4b^2+\mu^2}(q^2+q'^2)\right]$$

$$\times\left[\exp\left(\frac{2b^2}{3}\,\frac{b^2+\mu^2}{4b^2+\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{2b^2}{3}\,\frac{b^2+\mu^2}{4b^2+\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right]$$

$$+\frac{2\mu^3b^3V_0(S+2G)}{(2\pi)^{3/2}}\frac{1}{(3b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{4}\,\frac{2b^2+\mu^2}{3b^2+\mu^2}(q^2+q'^2)\right]$$

$$\times\left[\exp\left(\frac{b^2}{2}\,\frac{b^2}{3b^2+\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{b^2}{2}\,\frac{b^2}{3b^2+\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right]$$

$$-\frac{16\mu^3b^3V_0G}{(2\pi)^{3/2}}\frac{1}{(8b^2+3\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{4}\,\frac{12b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}(q^2+q'^2)\right]$$

$$\times\left\{\exp\left[\frac{2b^2(3b^2+\mu^2)}{8b^2+3\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right]+\exp\left[-\frac{2b^2(3b^{2'}+\mu^2)}{8b^2+3\mu^2}\,\bar{q}\,\bar{q}'\right]\right\}$$

$$+\frac{2\mu^3b^3V_0S}{(2\pi)^{3/2}}\,\frac{1}{(2b^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{3b^2+2\mu^2}{8}(q^2+q'^2)\right]\left[\exp\left(\frac{3b^2+2\mu^2}{4}\bar{q}\,\bar{q}'\right)+\exp\left(-\frac{3b^2+2\mu^2}{4}\bar{q}\,\bar{q}'\right)\right]. \quad \text{(A2)}$$

C. Projection on the multipoles

$$v_l(q,q')=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}16\mu^3b^3V_0(G-S)\left(\frac{4}{(8b^2+3\mu^2)^{3/2}}\left\{\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{12b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}\,q^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{8b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}\,q'^2\right)\right.\right.$$

$$+\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{12b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}\,q'^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{8b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}q^2\right)$$

$$\left.\times i_l\left[\frac{2b^2(2b^2+\mu^2)}{8b^2+3\mu^2}\bar{q}\,\bar{q}'\right]\right\}$$

$$-\frac{2^{3/2}}{(5b^2+2\mu^2)^{3/2}}\left[\exp\left(-\frac{b^2}{4}q^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{3b^2+2\mu^2}{5b^2+2\mu^2}\,q'^2\right)\right.$$

$$\left.+\exp\left(-\frac{b^2}{4}q'^2\right)\exp\left(-\frac{b^2}{4}\,\frac{3b^2+2\mu^2}{5b^2+2\mu^2}q^2\right)\right]\delta_{l,0}$$

$$-\frac{4}{3^{3/2}(2b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{5b^2}{12}(q^2+q'^2)\right]i_l\left(\frac{2b^2}{3}qq'\right)$$

$$\left.+\frac{1}{(2b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{4}(q^2+q'^2)\right]\delta_{l,0}\right)$$

$$-\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}32\mu^3b^3V_0(G+2S)\,\frac{1}{3^{3/2}(4b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{12}\,\frac{8b^2+5\mu^2}{4b^2+\mu^2}(q^2+q'^2)\right]i_l\left[\frac{2b^2(b^2+\mu^2)}{12b^2+3\mu^2}qq'\right]$$

$$+\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}4\mu^3b^3V_0(2G+S)\,\frac{1}{(3b^2+\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{4}\,\frac{2b^2+\mu^2}{3b^2+\mu^2}(q^2+q'^2)\right]i_l\left(\frac{b^2}{2}\,\frac{b^2}{3b^2+\mu^2}qq'\right)$$

$$-\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}32\mu^3b^3V_0G\,\frac{1}{(8b^2+3\mu^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{b^2}{4}\,\frac{12b^2+5\mu^2}{8b^2+3\mu^2}(q^2+q'^2)\right]i_l\left[\frac{2b^2(3b^2+\mu^2)}{8b^2+3\mu^2}qq'\right]$$

$$+\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}4\mu^3b^3V_0S\,\frac{1}{(2b^2)^{3/2}}\exp\left[-\frac{3b^2+2\mu^2}{8}(q^2+q'^2)\right]i_l\left(\frac{3b^2+2\mu^2}{4}qq'\right). \quad \text{(A3)}$$

## APPENDIX B: PROPERTIES OF THE INTEGRAL $I_l(q,q')$ [Eq. (29)]

In this Appendix, to shorten the notations, we omit the $z^2e^2$ factor appearing in the Coulomb potential defined in Eq. (39), and Eq. (29) becomes

$$I_l(q,q')=\int_0^{R_0}dR\,j_l(qR)\,j_l(q'R)R\,.$$

Let us work on a more general expression:

$$I_l^N(q,q')=\int_0^{R_0}dR\,j_l(qR)\,j_l(q'R)R^N\,. \quad \text{(B1)}$$

Applying

$$j_{l+1}(x)=\left(-\frac{d}{dx}+\frac{l}{x}\right)j_l(x)\,,$$

once to $j_l(qR)$ and once to $j_l(q'R)$, we obtain by summing the two expressions for $I_l^N$,

$$2l\,I_l^N=q'\int_0^{R_0}R^{N+1}dR\,j_l(qR)\,j_{l+1}(q'R)$$

$$+q\int_0^{R_0}R^{N+1}j_{l+1}(qR)\,j_l(q'R)$$

$$+\int_0^{R_0}R^{N+1}d(j_l(qR)\,j_l(q'R))\,.$$

We increase the order of $j_l(qR)$ and $j_l(q'R)$ and obtain, when integrating by parts and repeating the procedure, the final result

$$(2l+N-1)I_l^N-(2l+3)\frac{q^2+q'^2}{qq'}I_{l+1}^N+(2l-N+5)I_{l+2}^N$$

$$=R_0^{N+1}[j_l(qR_0)\,j_l(q'R_0)-j_{l+2}(qR_0)\,j_{l+2}(q'R_0)]\,. \quad \text{(B2)}$$

We notice that

$$(2l+N-1)I_l^N-(2l+3)\frac{q^2+q'^2}{qq'}I_{l+1}^N+(2l-N+5)I_{l+2}^N=0$$

is just the recursion relation for the Legendre polynomials $P_l^\mu(X)$ and $Q_l^\mu(X)$, where $\mu$ is related to $N$ and

$$X=\frac{q^2+q'^2}{2qq'}\ .$$

Consequently the $I_l^N$ have components on the $Q_l$ and therefore one must start the calculation of the $I_l^N$ by a decreasing recursion until the final result $I_0^N$. The consistency of the method depends on this value of $I_0^N$ which always can be obtained by a direct calculation.

When $q=q'$, due to

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,j_l^2(x)=1,$$

we establish the following relation:

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)I_l^N(q,q)=\frac{R_0^N+1}{N+1}\ . \qquad \text{(B3)}$$


[1]W. Wefelmeier, Naturwissenschaften 25, 525 (1967).
[2]D. L. Hill and J. A. Wheeler, Phys. Rev. 89, 1102 (1953); J. J. Griffin and J. A. Wheeler, *ibid.* 108, 311 (1957).
[3]R. E. Peierls and J. Yoccoz, Proc. Phys. Soc. Lond. A70, 381 (1957); W. H. Bassichis, B. Giraud, and G. Ripka, Phys. Rev. Lett. 15, 980 (1965); B. Giraud and P. U. Sauer, Phys. Lett. 30B, 218 (1969).
[4]H. Margenau, Phys. Rev. 59, 37 (1941).
[5]D. M. Brink, in *Many-Body Description of Nuclear Structure and Reactions, Proceedings of the International School of Physics, "Enrico Fermi," Course XXXVI*, edited by C. Bloch (Academic, New York, 1966).
[6]D. M. Brink and A. Weiguny, Nucl. Phys. A120, 59 (1968).
[7]C. W. Wong, Nucl. Phys. A147, 545 (1970); A197, 193 (1972).
[8]B. Giraud, J. C. Hocquenghem, and A. Lumbroso, Phys. Rev. C 7, 2274 (1973).
[9]J. A. Wheeler, Phys. Rev. 52, 1083 (1937).
[10]P. O. Lowdin, Phys. Rev. 97, 1474 (1955).
[11]A. Messiah, *Mecanique Quantique* (Dunod, Paris, 1962), Tome 1, p. 276.
[12]J. S. Schwinger, Phys. Rev. 93, 615 (1954).
[13]M. Baker, Ann. Phys. (N. Y.) 4, 271 (1958).
[14]R. Jost and A. Pais, Phys. Rev. 82, 840 (1951).
[15]W. P. Reinhardt and A. Szabo, Phys. Rev. A 1, 1162 (1970).
[16]S. A. Afzal, A. A. Z. Ahmad, and S. Ali, Rev. Mod. Phys. 41, 247 (1969).
[17]A. B. Volkov, Nucl. Phys. 74, 33 (1965).
[18]D. M. Brink and F. Boeker, Nucl. Phys. A91, 1 (1967).
[19]This limit to 30 fm is not at all important. Indeed, even when the upper limit of the integral is 10 fm the results are practically the same as the results obtained with an upper limit of 50 fm.
[20]S. Okai and S. C. Park, Phys. Rev. 145, 787 (1966).
[21]H. Federsel, E. Kanellopoulos, W. Sunkel, and K. Wildermuth, Phys. Lett. 33B, 140 (1970).
[22]N. de Takacsy, Phys. Rev. C 5, 1883 (1972).
[23]Horiuchi, Prog. Theor. Phys. 43, 375 (1970).

APPENDICE B

*Va-Fari* 74-23

# An Application of the Generator Co-ordinate Formalism: $\alpha$-$\alpha$ Scattering.

ALBERT LUMBROSO

*Service de Physique Théorique, Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay - Gif-sur-Yvette*

## 1. – Introduction.

In all the collective models we deal with a large number $N$ of nucleons of individual co-ordinates $x_1, \ldots, x_N$. If we want to study a particular degree of freedom (here we shall consider the relative distance $R$ between two interacting $\alpha$-particles), we try to express the total wave function $\psi(x_1, \ldots, x_N)$ of the system as a product of functions

$$\psi(x_1, \ldots, x_N) = F_1(R) F_2(\xi_1, \ldots, \xi_{N-1}) ,$$

where $F_1(R)$ is a function of the degree of freedom of interest and $F_2(\xi_1, \ldots, \xi_{N-1})$ is a function of the $N-1$ remaining internal variables.

In fact, two difficulties render this approach difficult to use:

*a*) How to express $R$ as a function of the $x_1, \ldots, x_N$?

*b*) How to antisymmetrize the wave function in the new variables?

To overcome these difficulties, the generator co-ordinate formalism keeps the individual co-ordinates and introduces a *parameter*, called the generator co-ordinate, to describe the degree of freedom.

## 2. – Short survey of the generator co-ordinate method (GCM).

We choose a basis $\Phi_r(x)$ depending on a continuous vector labelled $r$ which will be our generator co-ordinate. Here $x$ is a shorthand notation for $x_1, \ldots, x_N$. With this basis we construct a trial wave function which is an *approximate* solution of the total Hamiltonian $\mathscr{H}$ corresponding to the energy $E$

$$\psi(x) = \int \mathrm{d}r \, f(r) \Phi_r(x) .$$

In other words, when $r$ takes all the possible values we generate $\psi$ by taking the linear combination of $\Phi_r$ on the amplitude $f(r)$. As $r$ is a continuous vector label, $\psi(x)$ has the integral form above (see for instance Giraud's lectures). The amplitude $f(r)$ is called the Hill-Wheeler amplitude and contains all the information. The aim of this seminar is to point out some of the properties of $f(r)$ and to show how these properties lead to a solution of the Hill-Wheeler equation.

By using the variational principle one determines the best approximated solution of the Schrödinger equation

$$\mathscr{H}\psi = E\psi ,$$

and we have to solve the Hill-Wheeler equation

$$\int (H(r, r') - EN(r, r'))\, f(r')\, \mathrm{d}r' = 0 ,$$

where

$$H(r, r') = \langle \Phi_{r'} | \mathscr{H} | \Phi_r \rangle = T(r, r') + V(r, r')$$

is the energy kernel, $T$ and $V$ are respectively the kinetic and potential-energy kernels, and

$$N(r, r') = \langle \Phi_{r'} | \Phi_r \rangle$$

is the overlap kernel.

### 3. – Application to the $\alpha$-$\alpha$ system.

An $\alpha$-particle consists of two protons of spin up ($\uparrow$) and down ($\downarrow$) and two neutrons of spin up ($\uparrow$) and down ($\downarrow$). We consider here two $\alpha$-particles $A$ and $B$, centred at $+r/2$ and $-r/2$, referred to an arbitrary origin $O$.

We recall that in the GCM all the nucleons are treated on the same footing. If we cannot factorize out the c.m. motion, we get spurious solutions that we do not know how to eliminate. If we assume that the motion of *each* nucleon $i$ in this $\alpha$-$\alpha$ system is spatially described by the $Os$ orbital of an harmonic oscillator centred at $y$ (which means either $+r/2$ or $-r/2$)

$$\pi^{-\frac{3}{4}} b^{-\frac{3}{2}} \exp[-(r_i - y)^2/2b^2] ,$$

it becomes trivial to obtain separation between c.m. and relative motion.

We write the wave function of this eight-nucleon system in second quantization

$$|\Phi_r\rangle = a_p^\dagger(r/2)\, a_{\bar{p}}^\dagger(r/2)\, a_p^\dagger(-r/2)\, a_{\bar{p}}^\dagger(-r/2)\, a_n^\dagger(r/2)\, a_{\bar{n}}^\dagger(r/2)\, a_n^\dagger(-r/2)\, a_{\bar{n}}^\dagger(-r/2)|0\rangle .$$

In this expression $a_p^\dagger(a_{\bar{p}}^\dagger)$ represents the creation operator for a proton of spin up (down) and $a_n^\dagger(a_{\bar{n}}^\dagger)$ the corresponding operators for neutrons. These operators act on the vacuum $|0\rangle$ and obey the ordinary commutation rules for fermions. This notation is very practical for calculations, but for the sake of clarity let us write $\Phi_r$ in co-ordinate space

$$\Phi_r = (\pi^{-\frac{3}{4}} b^{-\frac{3}{2}})^8 \mathscr{A} \prod_{i=1}^{4} \exp[-(r_i - r/2)^2/2b^2] \prod_{j=5}^{8} \exp[-(r_j + r/2)^2/2b^2] .$$

We are calling $r_i$ and $r_j$ the individual co-ordinates, $r$ the generator co-ordinate and $b$ the harmonic-oscillator constant. The operator $\mathscr{A}$ is the antisymmetrization operator.

By performing in the last expression the following change of co-ordinates

$$R_A = \tfrac{1}{4} \sum_{i=1} r_i , \qquad R_B = \tfrac{1}{4} \sum_{j=5} r_j ,$$

$$R_{\text{c.m.}} = \tfrac{1}{2}(R_A + R_B) , \qquad R = \tfrac{1}{2}(R_A - R_B) ,$$

where $R_A$ and $R_B$ are the centre-of-mass co-ordinates of the clusters $A$ and $B$, $R_{\text{c.m.}}$ is the total centre-of-mass co-ordinate and $R$ the relative co-ordinate, the wave function becomes

$$\Phi_r = \pi^{-\frac{3}{4}} (b/2)^{-\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{4R_{\text{c.m.}}^2}{b^2}\right] \mathscr{A} \psi_{\text{int}}(A) \psi_{\text{int}}(B) \Gamma(r, R) .$$

As required the c.m. factorizes out, and the formalism having Galilean invariance we shall ignore this factor in the rest of the formalism. The functions $\psi_{\text{int}}(A)$ and $\psi_{\text{int}}(B)$ represent the internal wave functions for the α-clusters $A$ and $B$ and $\Gamma(r, R)$ is

$$\Gamma(r, R) = \pi^{-\frac{3}{4}} (b/\sqrt{2})^{-\frac{3}{2}} \exp[-(r - R)^2/b^2] .$$

In other words, this function $\Gamma(r, R)$ measures the fluctuations of $r$ around $R$. It is a function peaked around the mean position of $R$.

By inserting $\Phi_r$ in $\psi$ we obtain an expression formally equivalent to the resonating-group wave function

$$\psi = \mathscr{A} \psi_{\text{int}}(A) \psi_{\text{int}}(B) g(R) ,$$

where

$$g(R) = \pi^{-\frac{3}{4}} (b/\sqrt{2})^{-\frac{3}{2}} \int \exp[-(r - R)^2/b^2] f(r) \, \mathrm{d}^3 r ,$$

or

$$g(R) = \Gamma \otimes f ,$$

and the notation $\otimes$ indicates a convolution product.

The total Hamiltonian $\mathcal{H}$ contains

*a*) a kinetic-energy term;

*b*) a two-body nuclear interaction of the general form

$$V_{ij} = V_0 \exp[-(r_i - r_j)^2/\mu^2])(A + BP_\sigma + CP_\tau + DP_\sigma P_\tau) ,$$

where $V_0$ is the depth, $\mu$ the range of the interaction, $A$, $B$, $C$, $D$ the coefficients of the mixture and $P_\sigma$ and $P_\tau$ the usual exchange operators for spin and isospin;

*c*) a Coulomb interaction.

By performing calculations in co-ordinate space we obtain for the overlap

$$N(r, r') = [\exp[-(r - r')^2/8b^2] - \exp[-(r + r')^2/8b^2]]^4 ,$$

and expressions for $T(r, r')$ and $V(r, r')$ which are not shown here. We notice that

$$\lim_{\substack{r \to \infty \\ r' \to \infty}} N(r, r') = \exp[-(r - r')^2/2b^2] = \Gamma \otimes \Gamma ,$$

and asymptotically $\Gamma$ appears as a kind of square root of the overlap.

## 4. – Properties of the Hill-Wheeler amplitude.

We turn back now to our Hill-Wheeler equation written in matrix notation as

$$(T + V - EN) f = 0 .$$

We could try to solve this equation on a mesh by transforming it into an eigenvalue problem. For instance provided $N^{-\frac{1}{2}}$ exists, we obtain

$$(N^{-\frac{1}{2}}(T + V) N^{-\frac{1}{2}} - E)(N^{\frac{1}{2}} f) = 0 ,$$

and solve this eigenvalue problem for the unknown quantity $(N^{\frac{1}{2}} f)$. However $f$ is not a function. If one changes the mesh, the amplitude $f$ is not stable and the closer the integration points, the more violently $f$ oscillates.

These oscillations can be explained by looking at the Fourier transform of $g$ as defined precedently. Calling $f(q)$ the Fourier transform of $f(r)$ we find

$$g(q) = f(q) \Gamma(q) ,$$

and the convolution product becomes an ordinary product. In this representation $\Gamma(q)$ is proportional to

$$\exp[-b^2q^2/2],$$

and now we see that

$$f(q) \propto \exp[b^2q^2/2]g(q)$$

is highly divergent when $q \to \infty$ $(r \to 0)$ and has no Fourier transform back to co-ordinate space in the sense of ordinary functions. It is not even a tempered distribution.

## 5. – Method of solution for scattering cases.

The properties shown above impose a rapid decrease of $g(q)$ when $q \to \infty$. For a bound-state problem $g(q)$ might decrease fast enough and hence we might discretize and replace the infinite upper limit of the HW integral by a finite limit and thus solve this equation in the co-ordinate system.

For a scattering problem the solution $g(q)$ does not fall to zero fast enough when $q \to \infty$ and we cannot work in co-ordinate space.

By performing a very straightforward Fourier transform of $N$, $T$ and $V$ we see that these kernels in momentum representation are convergent enough to compensate for the divergent factor in $f$.

Finally the solution consists in solving the following equation (and $\Gamma^{-1}$ exists now)

$$\Gamma^{-1}(H - EN)\Gamma^{-1}g = 0$$

in momentum space.

The Fourier transform of $N$, $T$, $V$ after removal of the exponential divergence becomes

$$n(q, q') = \Gamma^{-1}N\Gamma^{-1} = \delta(q - q') + \nu(q, q'),$$

$$t(q, q') = \Gamma^{-1}T\Gamma^{-1} = \frac{\hbar^2}{2M}q^2\delta(q - q') + \theta(q, q'),$$

$$v(q, q') = \Gamma^{-1}V\Gamma^{-1},$$

where $\nu(q, q')$ and $\theta(q, q')$ represent the exchange terms due to the Pauli principle. Calling $k$ the wave number corresponding to the relative energy, we are led to a class of Fredholm equations

$$(k^2 - q^2)\,g(q) = \int W(q, q')\,g(q')\,\mathrm{d}^3q'$$

for the kernel

$$W(q, q') = \theta(q, q') + v(q, q') - Ev(q, q') .$$

It remains to project onto allowed (even) waves and to extract the phase shifts by use of any adequate method.

## 6. – Introduction of the Coulomb interaction.

Due to difficulties in performing a Fourier transform for the truncated Coulomb potential we keep only the direct and total exchange terms. Physically these terms contribute more than processes involving one or two nucleons exchanges between the $\alpha$. We introduce the Coulomb interaction directly in the momentum representation

$$Eg(q) = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} g(q) + \int v_c(q - q') g(q') \, \mathrm{d}^3 q' ,$$

where $v_c(q - q')$ is the Fourier transform of the Coulomb potential. We have to introduce in $W_l(q, q')$ the additional term

$$I_l(q, q') = \int j_l(qR) \, j_l(q' R) \, v_c(R) \, \mathrm{d}^3 R ,$$

where $j_l$ represents the $l$-th spherical Bessel function.

When the Coulomb interaction is truncated, as in our case, there is not a closed formula to express $I_l$ and it cannot be numerically calculated by standard integration methods due to the presence of the Bessel function.

When the Coulomb interaction is truncated, as in our case, there is not a closed formula to express $I_l$ and it cannot be numerically calculated by standard integration methods due to the presence of the Bessel function.

One has the following recursion formula to which $I_l$ obeys:

$$lI_{l-1} - (2l + 1) X I_l + (l + 1) I_{l+1} = \frac{R_0^2}{2} \left[ j_{l-1}(qR_0) j_{l-1}(q' R_0) - j_{l+1}(qR_0) j_{l+1}(qR_0) \right] ,$$

and $X = (q^2 + q'^2)/2qq'$, $R_0$ being the cut-off of the Coulomb potential.

## 7. – Results.

We recall that in this calculation we treat completely the antisymmetrization between the nucleons for the nuclear interaction. An additional assumption is necessary for the Coulomb potential.

Fig. 1. – $\alpha$-$\alpha$ phase shifts for $l = 0$ (▲), $l = 2$ (+), $l = 4$ (●) and $l = 6$ (×).

Another point is that there has been no adjustment of the parameters. We use the harmonic-oscillator constant ($b = 1.36$ fm) obtained from the radius of an α-particle and a Volkov ($m = 0.56$) interaction for the nuclear potential. The cut-off of the Coulomb interaction is reasonable (and fits the well-known formula for the Coulomb phase shifts).

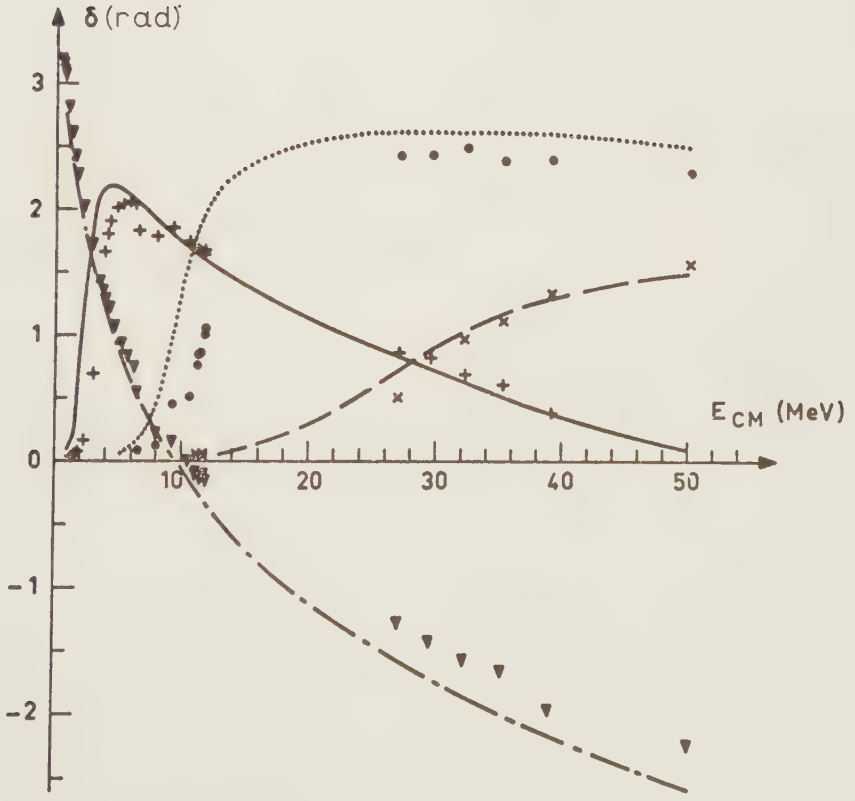
The agreement with experimental results is good even at 50 MeV in the c.m. system and confirms that this method could be, under some new assumptions, used in heavier nuclei. For instance, as we have the real part of an optical potential, we can use this potential as an effective α-α interaction to treat nuclei as systems of α-particles.

## 8. – Conclusion.

We have seen here how one can treat the Hill-Wheeler equation for scattering states, using only real variables. The problem of two colliding nuclei becomes the problem of a particle scattered by a nonlocal energy-dependent potential in which the Pauli principle appears explicitly. One of the advantages of this formalism is that it can be extended to heavier ions.

This formalism has been extended to treat several channels and a generalization due to TABAKIN allows compressibility while here, as $b$ remains constant, the nuclei are supposed incompressible.

r/2
r/2
0


δ (rad)
3
2
1
0
-1
-2
10
20
30
40
50
E CM (MeV)

APPENDICE C

*Reprinted from:*

PHYSICAL REVIEW C VOLUME 7, NUMBER 6 JUNE 1973

# Generator Coordinate Method for Scattering: An Exact Solution

B. Giraud, J. C. Hocquenghem, and A. Lumbroso*

*Service de Physique Théorique, Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay B. P. n°2 - 91, Gif-sur-Yvette, France*

(Received 18 October 1972)

An analytically soluble model is given for which an exact numerical solution of the Hill-Wheeler equation in the continuum can be calculated. Properties of this model, which concern in particular the effects of the Pauli principle and the microscopic definition of an optical potential, are considered.

## I. INTRODUCTION

It is well known that one of the first physical phenomena for the description of which the generator-coordinate formalism was invented by Griffin, Hill, and Wheeler[1] was this very peculiar nuclear reaction called fission. Actually, for many years the formalism was applied to bound-state problems only, such as nuclear rotations with[2] or without[3] axial symmetry or the study of nuclear shapes and collective motions in light nuclei.[4] In the last few years a fundamental reappraisal of this formalism was made by Jancovici and Schiff,[5] Brink and Weiguny,[6] and Wong[7] and revealed how powerful and general this method was. The elaboration of a generator-coordinate theory of nuclear reactions was undertaken and revived by several authors,[8-17] and it is gratifying that a first success has been achieved with their discoveries of not one, but several, quite different solutions of the Hill-Wheeler equation. One must notice, however, that these solutions have been used only in the case of collisions between (very) light nuclei and that the ultimate aim (namely a microscopic theory of collisions between heavy ions and of fission) is not likely to be reached without suitable approximations in order to avoid enormous calculations.

As in most generator-coordinate problems, three main questions may be asked:
(i) What generator coordinates are relevant to the problem?
(ii) What generating functions must be labeled by these generator coordinates?
(iii) How should the Hill-Wheeler equation be solved?

### A. Choice of the Generator Coordinates

There is no doubt that the distance between colliding nuclei is here the most important degree of freedom and this consideration decides the choice of the first generator coordinate. As shown by Wong,[16] complete Galilean invariance for the most general calculation [no factorized center-of-mass wave function as in Eq. (3)] would demand the use of additional coordinates corresponding to an acceleration of the clusters. It is also most tempting to take in account other degrees of freedom[11,16] such as the deformation of the clusters if they polarize each other during collision or the decompression of the "compound" nucleus in order to correct for the unrealistic prompt[18] limit at low energies. Also the question of complex[6,13,16] generator coordinates arises. In view of the difficulties which yet pave the way to a reliable solution of the Hill-Wheeler equation in most cases, it seems that the present status of the theory is more adapted to calculations with one generator coordinate only. (We do not count the case of generator coordinates which correspond to the restoration of a broken symmetry as an additional unreasonable task.) In order to gain a better understanding of the nuclear reactions in the interaction region, we thus advocate, in general, keeping the separation distance as the only generator coordinate and increasing the dimensions of the generator-coordinate subspace by either a set of discrete configurations of the "compound" nucleus or the coupling of various channels.

### B. Choice of the Generating Functions

We want to specify a set of wave functions $\Phi_r$, depending on a continuous vector label $r$ (the generator coordinate) and describing two nuclei $(A)$ and $(B)$ at this relative distance $r$. The aim of the formalism is then to find the many-body wave function,

$$\Psi = \int dr\, f(r)\Phi_r\,, \tag{1}$$

which, by a suitable choice of the Hill-Wheeler amplitude $f(r)$, describes the scattering of these clusters.

Since by definition the interaction region ($|r| <$ a few times $b$) breaks Galilean invariance for the relative motion, the choice of $\Phi_r$ in this latter region is more a matter of nuclear dynamics (two-center shell model,[18] constrained Hartree-Fock,[19] ...) than of kinematics. In the asymptotic region, Galilean invariance for each nucleus can always

be obtained in principle by means of a projection operator[20] for any nucleus $(A)$ with any internal structure $\psi^{\text{int}}$, giving then for the wave function of $(A)$

$$\Psi_A = \pi^{-3/4}\left(\frac{b}{\sqrt{A}}\right)^{-3/2} \times \exp\left(-\frac{A[R_A - Br/(A+B)]^2}{b^2}\right)\psi^{\text{int}}(\xi_A),$$

where $A$ and $B$ are the nucleon numbers of nuclei $(A)$ and $(B)$. This might give prohibitive configuration mixings, however, if harmonic-oscillator orbitals cannot be used because of $\psi^{\text{int}}(\xi)$. The double projection method of Wong[16] for the extraction of invariant nucleus structure might then be much better. Then if we take for $\Phi_r$ the antisymmetrized product of $\Psi_A$ and $\Psi_B$ we keep Galilean invariance of the relative motion in the asymptotic region (large $r$).

### C. Solutions of the Hill-Wheeler Equation

Among the solutions which have been proposed we may quote the following: (i) a boundary condition constraint method[9]; (ii) a direct, discretized solution in coordinate space[12]; (iii) a soluble model in coordinate space.[14]

Only in the first solution were Coulomb effects included. Solutions (i) and (ii) concern $f$. The last solution concerns a function $g$ (which in the asymptotic region becomes identical with the relative-motion wave function), and gives detailed understanding of the effective potential and the effects of antisymmetrization, at least for simple cases where the formal expressions can be obtained (for instance when the one-particle basis and the potential are Gaussian). A choice between these solutions might be easier if the calculation of the kernels could be simplified, for instance by an omission of possibly weak terms due to core nucleons (or exchange terms) or by a suitable parametrization of these kernels.

The purpose of the present paper is to present a soluble model in momentum space and to discuss some of the physical insight that this formalism provides. The basic formalism is presented in Sec. II. Discussions and proposals for approximations are given in Sec. III. Section IV is our conclusion.

## II. BASIC FORMALISM AND ILLUSTRATIVE EXAMPLE OF AN EXACT SOLUTION

In this section, we recall with some detail the analytical illustrative example of Ref. 10. The example is a system of twice two neutrons (dineutron) in an elastic collision. The simplicity of the system allows us to describe the basic formalism without too much complication and it seems to us an easier way to make things comprehensible.

### A. Basis $\Phi_{\vec{r}}^{\pm}$

The simplest case which is interesting for us as a significant illustrative example of our theory corresponds to

$$\Phi_{\vec{r}}^{\pm} = \sqrt{6}\ \mathcal{A}_{12,34}\left[\sqrt{2}\ \mathcal{A}_{12}\pi^{-3/2}b^{-3}\exp\left(-\frac{(\vec{r}_1-\vec{r}/2)^2+(\vec{r}_2-\vec{r}/2)^2}{2b^2}\right)\chi_1^+\chi_2^-\right] \times\left[\sqrt{2}\ \mathcal{A}_{34}\pi^{-3/2}b^{-3}\exp\left(-\frac{(\vec{r}_3+\vec{r}/2)^2+(\vec{r}_4+\vec{r}/2)^2}{2b^2}\right)\chi_3^+\chi_4^-\right]. \tag{2}$$

The first bracket in Eq. (2) is the wave function of a cluster $(A)$ made of two neutrons with coordinate vectors $\vec{r}_1$ and $\vec{r}_2$ and spin functions $\chi_1$ and $\chi_2$ ($\chi^+$ and $\chi^-$ correspond to spin up and down, respectively). The spatial wave functions for both these neutrons are Gaussian wave packets ( of length $b$) which are centered about the point with coordinate vector $\vec{r}/2$. The second bracket has obviously the same meaning, except that the second cluster $(B)$ is centered about $-\vec{r}/2$. Each cluster is antisymmetrized by means of the proper operator, for instance here $\mathcal{A}_{12} = \frac{1}{2}(1 - P_{12})$, where $P_{12}$ exchanges nucleons 1 and 2. Complete antisymmetry between both clusters is obtained through the usual operator $\mathcal{A}_{12,34} = \frac{1}{6}(1 - P_{13} - P_{14} - P_{23} - P_{24} + P_{13}P_{24} + P_{14}P_{23})$.

### B. Relation with the Resonating Group Method

The first bracket in Eq. (2) can be rewritten as

$$\pi^{-3/4}\left(\frac{b}{\sqrt{2}}\right)^{-3/2}\exp\left(-\frac{\vec{R}_A-\vec{r}/2}{b^2}\right)^2\psi_A^{\text{int}}(\vec{\xi}_A), \tag{3}$$

where $\vec{R}_A$ is the center-of-mass coordinate, $\vec{R}_A = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$, and $\phi_A^{\text{int}}$ depends only on the internal coordinate $\vec{\xi}_A = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. The same property holds of course for the second bracket if we replace $\vec{R}_A$, $\psi_A^{\text{int}}$, and $\vec{\xi}_A$ by $\vec{R}_B$, $\psi_B^{\text{int}}$, and $\vec{\xi}_B$. If we now reduce $\vec{R}_A$ and $\vec{R}_B$ to their relative coordinate $\vec{\rho} = \vec{R}_A - \vec{R}_B$ and center-of-mass coordinate $\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{R}_A + \vec{R}_B)$, we find

$$\Phi_\tau^\uparrow = \pi^{-3/4}\left(\frac{b}{2}\right)^{-3/2} \exp\left(-\frac{2R^2}{b^2}\right)\sqrt{6}\ \mathcal{A}_{12,34}\Gamma(\vec{\rho},\vec{r})\psi_A^{\text{int}}(\vec{\xi}_A)\psi_B^{\text{int}}(\vec{\xi}_B) \tag{4}$$

with

$$\Gamma(\vec{\rho},\vec{r}) = \pi^{-3/4}b^{-3/2}\exp\left(-\frac{(\vec{\rho}-\vec{r})^2}{2b^2}\right). \tag{5}$$

In this equation (4) we notice that the total center of mass is in a Gaussian wave packet (i) centered about the origin, (ii) obviously a state with zero angular momentum, (iii) independent of $\vec{r}$.

The formalism is thus Galilean invariant and we can forget the center of mass (c.m.) in the following.

We also notice in Eqs. (4) and (5) that the dynamical distance coordinate $\vec{\rho}$ between the two clusters fluctuates in a wave packet about the generator coordinate $\vec{r}$. This was indeed expected from the definition of $\Phi_\tau^\uparrow$. At short distances, however, the physical meaning of $\vec{r}$ becomes ill-defined because of the antisymmetrization. This question of antisymmetrization will be considered in subsection II D.

If we now insert Eqs. (4) and (5) into Eq. (1) we find

$$\Psi = \text{c.m.}\sqrt{6}\ \mathcal{A}_{12,34}g(\vec{\rho})\psi_A^{\text{int}}(\vec{\xi}_A)\psi_B^{\text{int}}(\vec{\xi}_B) \tag{6}$$

with

$$g(\vec{\rho}) = \int d\vec{r}\ \Gamma(\vec{\rho},\vec{r})f(\vec{r}). \tag{7}$$

We recognize that the function $g(\vec{\rho})$ is the usual scattering (or possibly bound) wave and that our formalism is equivalent to the resonating group method (RGM).[21] As we show in the next subsection, however, the generator-coordinate formulation of scattering might lead to calculations easier than those of the RGM, for it is never necessary to use relative coordinates $\vec{\rho}$, $\vec{\xi}_A$, $\vec{\xi}_B$. All calculations can be performed with the single-nucleon coordinates $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, ....

### C. Hill-Wheeler Equation

It is now convenient to rewrite Eq. (2) in second quantization. This is trivial because $\Phi_\tau^\uparrow$ is a Slater determinant, and this can be generalized by means of suitable translation operators if clusters $(A)$ and $(B)$ must be described by configuration mixings. In the present case, we define the creation operator $a_\pm^\dagger(\vec{y})$ of a neutron with spin up (down) in a Gaussian wave packet of length $b$ centered about the point of vector coordinate $\vec{y}$, and we obtain

$$|\Phi_\tau^\uparrow\rangle = a_-^\dagger\left(-\frac{\vec{r}}{2}\right)a_+^\dagger\left(-\frac{\vec{r}}{2}\right)a_-^\dagger\left(\frac{\vec{r}}{2}\right)a_+^\dagger\left(\frac{\vec{r}}{2}\right)|0\rangle, \tag{8}$$

where $|0\rangle$ is the vacuum.

Our Hamiltonian $H$ contains the kinetic energy of all nucleons and a two-body potential $\sum_{i<j}V_{ij}$, where

$$V_{ij} = U_0\exp\left(-\frac{(\vec{r}_i-\vec{r}_j)^2}{\mu^2}\right)(A + BP_\sigma + CP_\tau + DP_\sigma P_\tau). \tag{9}$$

In Eq. (9), $U_0$ is the potential depth, $\mu$ is the range, $P_\sigma$ and $P_\tau$ are exchange operators for spin and isospin, and $A, B, C, D$ give the corresponding exchange mixture.

We take advantage of Eq. (8) to calculate the kernels

$$H(\vec{r},\vec{r}') = \langle\Phi_\tau^\uparrow|H|\Phi_\tau^{\uparrow\prime}\rangle \tag{10a}$$

and

$$N(\vec{r},\vec{r}') = \langle\Phi_\tau^\uparrow|\Phi_\tau^{\uparrow\prime}\rangle \tag{10b}$$

of the Hill-Wheeler equation. The second-quantization technique we used is that of Löwdin[22] and has al-

ready been used by many authors. We thus find the overlap operator

$$N(\vec{r},\vec{r}') = \left[\exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{8b^2}\right) - \exp\left(-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{8b^2}\right)\right]^2 . \tag{11}$$

As regards the Hamiltonian kernel $H(\vec{r},\vec{r}')$, we can take into account the fact that only the *relative* energy between the clusters is of interest in the formalism. It is then necessary to subtract from the total energy of this four-nucleon system:
(i) the internal energy of each cluster, namely, if we call the nucleon mass $m$, $T^{\text{int}} = \frac{3}{4}\hbar^2/(mb^2)$ for the kinetic energy and, as it can be shown in a trivial calculation, $V^{\text{int}} = 2U_0(A-B+C-D)(1+2b^2/\mu^2)^{-3/2}$ for the potential energy;
(ii) the kinetic energy of the total center of mass, $T^{\text{c.m.}} = \frac{3}{4}\hbar^2/(mb^2)$.
If thus we subtract from the Hamiltonian kernel the quantity $(2T^{\text{int}} + 2V^{\text{int}} + T^{\text{c.m.}})N(\vec{r},\vec{r}')$, the eigenvalue $E$ which is left in the Hill-Wheeler equation is the relative kinetic energy $(\hbar^2k^2)/(2m)$ between the two clusters (where $k$ is the relative wave number). The new Hamiltonian kernel $H'$ is then the sum of a kinetic-energy part,

$$T(\vec{r},\vec{r}') = \frac{\hbar^2}{mb^2}\left[\exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{8b^2}\right) - \exp\left(-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{8b^2}\right)\right]$$
$$\times\left\{\left[\frac{3}{4} - \frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{8b^2}\right]\exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{8b^2}\right) - \left[\frac{3}{4} - \frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{8b^2}\right]\exp\left(-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{8b^2}\right)\right\}, \tag{12}$$

and of a potential-energy part,

$$V(\vec{r},\vec{r}') = 2U_0(1+2b^2/\mu^2)^{-3/2}\times 2(A-B+C-D)\exp\left(-\frac{r^2+r'^2}{4b^2}\right)\left[1-\exp\left(-\frac{r^2}{8b^2+4\mu^2}\right) - \exp\left(-\frac{r'^2}{8b^2+4\mu^2}\right)\right]$$
$$+(2A+B+2C+D)\left[\exp\left(-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}\right)\exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{4b^2}\right) + \exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}\right)\exp\left(-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{4b^2}\right)\right]$$
$$-(A+2B+C+2D)\exp\left(-\frac{\vec{r}^2+\vec{r}'^2}{4b^2}\right)\left[\exp\left(-\frac{(\vec{r}+\vec{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}\right) + \exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}\right)\right]. \tag{13}$$

We point out that for large values of $\vec{r}$ and (or) $\vec{r}'$, the kernels $N$, $T$, $V$ have the following properties:
(i) $N(\vec{r},\vec{r}')$ becomes Gaussian, and actually $N \approx \Gamma^2$;
(ii) $T(\vec{r},\vec{r}')$ also fulfills the Gaussian overlap and quadratic-approximation conditions,[6] and the kinetic energy $\frac{3}{4}\hbar^2/(mb^2)$ due to the zero-point relative motion coexists with significant negative-energy contributions due to the *nonlocality* of this kernel (indeed the limit $\mathcal{T}$ of $T$ in the region depends only on $\vec{x} = \vec{r} - \vec{r}'$ and $\int \mathcal{T}(\vec{x})\, d\vec{x} = 0$);
(iii) $V(r,r')$ is negligible.

### D. Exact Solution

Given the Hill-Wheeler equation

$$\int d\vec{r}'\,[T(\vec{r},\vec{r}') + V(\vec{r},\vec{r}') - EN(\vec{r},\vec{r}')]f(\vec{r}') = 0, \tag{14a}$$

or, in operator notation

$$(T+V-EN)f = 0, \tag{14b}$$

we can reduce it to an operator diagonalization problem by two methods, namely the following transformed equations: either

$$[N^{-1/2}(T+V)N^{-1/2} - E](N^{1/2}f) = 0, \tag{15}$$

or

$$[(T+V)N^{-1} - E](Nf) = 0. \tag{16}$$

By definition [Eq. (10b)] the kernel $N$ is nonnegative and therefore $N^{1/2}$ is well defined. But there might arise difficulties in either method, for the inversion of $N$ or $N^{1/2}$ could be singular. In the latter method [Eq. (16)] the operator $(T+V)N^{-1}$ is non-Hermitian. It thus seems preferable to stick to the former, [Eq.

(15)]. Also, from the remark (i) we made just above, concerning the fact that $N \approx \Gamma^2$ in the asymptotic regions (large $\vec{r}$ or $\vec{r}'$), the problem of finding the square root $N^{1/2}$ of the operator $N$ is almost solved by the knowledge of $\Gamma$. Finally, in view of Eq. (7), it is clear that it is physically very useful to consider $g = \Gamma f$ as the proper unknown function in our formalism. The corresponding, minor modification of Eq. (15) is thus

$$\Gamma^{-1}(T + V - EN)\Gamma^{-1} g = 0 \tag{17}$$

and this has the further advantage that the boundary conditions for $g$ are the well known conditions for scattering waves, while the prescription of suitable boundary conditions for $f$ may still be considered as an open problem.

The inversion of $\Gamma$, however, is not a regular operation in coordinate space. This well-known difficulty is clearly revealed by the Fourier transform

$$\Gamma(\vec{q}, \vec{q}') = \pi^{-3/4} b^{3/2} \exp\left(-\frac{b^2 q^2}{2}\right) \delta(\vec{q} - \vec{q}') \tag{18}$$

which shows that $\Gamma^{-1}$ diverges at high frequencies. This divergence, however, is compensated by the strong decrease (at high frequencies) of the Fourier transforms of $N, T, V$;

$$N(\vec{q}, \vec{q}') = (4\pi)^{3/2} b^3 \exp(-b^2 q^2)[\delta(\vec{q} - \vec{q}') + \delta(\vec{q} + \vec{q}')] - 16 b^6 \exp[-b^2(q^2 + q'^2)], \tag{19}$$

$$T(\vec{q}, \vec{q}') = \frac{\hbar^2}{m b^2}\left\{(4\pi)^{3/2} b^3 \frac{b^2 q^2}{2} \exp(-b^2 q^2)[\delta(\vec{q} - \vec{q}') + \delta(\vec{q} + \vec{q}')] - 8 b^6 [b^2(q^2 + q'^2) - \tfrac{3}{2}] \exp[-b^2(q^2 + q'^2)]\right\}, \tag{20}$$

$$\begin{aligned} V(\vec{q}, \vec{q}') = {} & 2U_0(1 + 2b^2/\mu^2)^{-3/2} 2(A - B + C - D)(b\sqrt{2})^6 \\ & \times \left\{\exp[-b^2(q^2 + q'^2)] - \left(\frac{\beta}{b\sqrt{2}}\right)^3 \left[\exp\left(-\frac{\beta^2 q^2}{2}\right)\exp(-b^2 q'^2) + \exp(-b^2 q^2)\exp\left(-\frac{\beta^2 q'^2}{2}\right)\right]\right\} \\ & + (2A + B + 2C + D)(\alpha b)^3 \left[\exp\left(-\frac{(2b^2 + \mu^2)(\vec{q} - \vec{q}')^2 + b^2(\vec{q} + \vec{q}')^2}{4}\right) + \exp\left(-\frac{b^2(\vec{q} - \vec{q}')^2 + (2b^2 + \mu^2)(\vec{q} + \vec{q}')^2}{4}\right)\right] \\ & - (A + 2B + C + 2D)(\gamma b\sqrt{2})^3 \left\{\exp\left[-\frac{b^2\alpha^2(\vec{q} - \vec{q}')^2}{2(4b^2 + \mu^2)} - \frac{b^2}{2}(\vec{q} + \vec{q}')^2\right] + \exp\left[-\frac{b^2\alpha^2(\vec{q} + \vec{q}')^2}{2(4b^2 + \mu^2)} - \frac{b^2}{2}(\vec{q} - \vec{q}')^2\right]\right\}, \end{aligned} \tag{21}$$

with

$$\alpha^2 = 2b^2 + \mu^2, \quad \frac{1}{\beta^2} = \frac{1}{2\alpha^2} + \frac{1}{2b^2}, \quad \frac{1}{\gamma^2} = \frac{1}{\alpha^2} + \frac{1}{2b^2}. \tag{21'}$$

No critical divergence is left for the resulting kernels $n = \Gamma^{-1} N \Gamma^{-1}$, $t = \Gamma^{-1} T \Gamma^{-1}$, and $v = \Gamma^{-1} V \Gamma^{-1}$. For instance, we find

$$n(\vec{q}, \vec{q}') = 2(2\pi)^3 \left[\frac{\delta(\vec{q} - \vec{q}') + \delta(\vec{q} + \vec{q}')}{2} - \pi^{-3/4} b^{3/2} \exp\left(-\frac{b^2 q^2}{2}\right)\exp\left(-\frac{b^2 q'^2}{2}\right) b^{3/2} \pi^{-3/4}\right], \tag{22}$$

$$t(\vec{q}, \vec{q}') = 2(2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{2m}\left[q^2 \frac{\delta(\vec{q} - \vec{q}') + \delta(\vec{q} + \vec{q}')}{2} - \pi^{-3/4} b^{3/2} \exp\left(-\frac{b^2 q^2}{2}\right)\left(q^2 + q'^2 - \frac{3}{2b^2}\right)\exp\left(-\frac{b^2 q'^2}{2}\right) b^{3/2} \pi^{-3/4}\right]. \tag{23}$$

If we divide all kernels $n, t, v$ by the irrelevant constant $2(2\pi)^3$ and restrict ourselves to even waves $g(\vec{q})$, we can conclude that the final form of Eq. (17) is a Schrödinger equation in momentum representation

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} q^2 - E\right) g(\vec{q}) + \int dq' [\Omega(\vec{q}, \vec{q}') + v(\vec{q}, \vec{q}') + EQ(\vec{q}, \vec{q}')] g(\vec{q}') = 0. \tag{24}$$

### E. Calculation of Phase Shifts

After a proper multipole expansion of $g(\vec{q})$ and $w(\vec{q}, \vec{q}')$ (with $w = \Omega + v + EQ$) we write Eq. (24) as (all angular momentum labels omitted)

$$(q^2 - k^2)g(q) + \int_0^\infty dq' w(q, q')g(q') = 0 . \tag{25}$$

The corresponding equation for the reaction matrix is

$$K(q, k) = w(q, k) + \int_0^\infty dq' w(q, q') \frac{P}{k^2 - q'^2} K(q', k), \tag{26}$$

where $P$ denotes a principal-part value. A suitable discretization of the principal-part integral gives

$$K(q_i, k) = w(q_i, k) + \sum_{j=1}^{M} w(q_i, q_j) \frac{\omega_j}{k^2 - q_j^2} K(q_j, k), \quad i, j = 1, M , \tag{27}$$

where the $M$ numbers $\omega_j$ are the integration weights related to the $M$ points $q_j$ of the integration mesh. The mesh and weights must of course be adapted to the principal part integration and necessarily $q_j \neq k$, $\forall j$. The values of the $M$ unknown quantities $K(q_i, k)$ are thus the solutions of a system of $M$ linear equations (27). It is then trivial to derive the "on-shell" reaction matrix $K(k, k)$, whence the phase shift

$$tg\eta(k) = -\frac{\pi}{2k} K(k, k) . \tag{28}$$

For the sake of completeness we reproduce in the table below the results obtained[10] in the $S$ wave with the Brink and Boeker force $B1$,[23] and a size parameter $b = 1.5$ fm, although the choice of $\Phi_\tau^+$ [Eq. (2)] is physically unrealistic. The energy range, from 0 to 1000 MeV, is also unrealistic when compared to the validity range of our one-channel description of elastic scattering, but it was chosen for a complete check of numerical accuracy:

| $E$ (MeV) | 0 | 3 | 10 | 20 | 40 | 50 | 60 | 70 | 100 | 200 | 400 | 500 | 1000 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\eta$ (rad) | 3.14 | 2.2 | 1.48 | 0.90 | 0.30 | 0.12 | −0.02 | −0.14 | −0.40 | −0.83 | −1.02 | −1.00 | −0.79 |

## III. DISCUSSION

Besides the several mathematical properties which have been encountered in the previous section in the process of derivation and solution of the Hill-Wheeler equation, one may notice three main physical aspects: occurrence of the exact reduced mass, effects of the Pauli principle, and calculation of an effective microscopic potential.

It is remarkable that the mass which appears in our final Schrödinger equation (24) is the exact reduced mass. It is clear that this occurrence of the correct reduced mass is due to the fact that $\Phi_r$ [Eq. (4)] corresponds to Galilean invariance of the *relative* motion in the *asymptotic* region (large $r$).

It is often claimed that the way to parametrize the behavior of the colliding system in the interaction region is to use an effective mass (which of course would tend to the reduced mass in the asymptotic region). We have just seen, however, that only the reduced mass appears in the present exact formalism, together with local potentials, nonlocal potentials, and pseudopotentials. The conversion of these *nonlocal* terms into corrections from the reduced mass to an effective mass would amount to replacing square-integrable operators by the presumed correction

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{m_{\text{eff}}(\rho)} - \frac{1}{m_{\text{red}}}\right]\frac{d^2}{d\rho^2} ,$$

which is no longer square-integrable (nor Hermitian, but a symmetrization is possible). As far as we know, the consequences of this mathematical modifcation of the formalism have not been studied and deserve more attention.

We now turn to the problem of the influence of the Pauli principle on our formalism. A simple inspection of Eqs. (19)–(23) proves that the action of any of the operators $N$, $T$, $V$ $(n, t, v)$ upon any odd-parity function $f_{\text{odd}}(q)$ or $g_{\text{odd}}(q)$ gives a vanishing result. This corresponds of course to the fact that we have considered the collision of identical even nuclei. Besides the potential kernel $v$, Eq. (24) contains two pseudopotentials $\Omega$ and $Q$ which are the non-$\delta$-function terms shown by Eqs. (22) and (23). These pseudopotentials are due to exchange matrix elements in the calculation of the kinetic energy and overlap kernels. As shown in Ref. 10 and generalized by Zaikin[15] the role of $Q$ is to take in account the effects of the Pauli principle which remain after we have eliminated the

odd waves $g_{odd}$. The same role was already known in the framework of the resonating-group method.[24] An inspection of kernel $Q$ reveals that it is a projector $|0s\rangle\langle 0s|$ onto the $0s$ harmonic-oscillator state of relative motion between the colliding dineutrons. This $0s$ state of relative motion is indeed forbidden by the Pauli principle, as it may be readily seen if one counts the number of oscillator quanta which are present in $\Phi_r$ when $r \to 0$ (one must normalize $\Phi_r$ to unity in this limit process). The kernel $n = 1 - Q$ is thus the projector onto the waves of relative motion which are allowed by the Pauli principle, namely, in the present case, all even-parity states except for the $0s$. A similar inspection of kernel $t$ [Eq. (23)] reveals that the "forbidden states" by $n$ are also forbidden by $t$; in other words, there is an operator $\theta$ which fulfills the identity $t \equiv (1-Q)\theta(1-Q)$. Finally a simple but tedious calculation shows that the potential kernel $v$ has the same property $v \equiv (1-Q) \times v(1-Q)$. More details can be found in Zaikin,[15] where this result is extended.

Finally, as regards the validity of an optical potential, several points can be raised. It has been seen above that the transformation of the Hill-Wheeler equation into an equivalent Schrödinger equation leads to an effective potential $w$, namely the bracket $[\Omega + v + EQ]$ of Eq. (24). This potential is of a great physical interest in itself and may be analyzed either in momentum space or through a Fourier transform back to coordinate space. However, the burden of calculations in realistic cases becomes rapidly prohibitive and one may think of replacing $w$ by an optical potential. In each specific case the detailed analysis of $w$ must allow us to determine which terms are important (for instance it has been shown in Ref. 10 that the exchange terms in $n$ was not) so as to obtain a simplified expression. We can hope that this will lead to prescriptions for calculations of optical potentials.

## IV. CONCLUSION

The results which have been achieved may be summarized as follows: transformation of the Hill-Wheeler equation into a Schrödinger equation allowing the calculation of the phase shifts in a simple way, understanding of the Pauli principle effects, obtaining a way of derivation of the optical potential starting from the nucleon-nucleon force.

The next steps which are desirable are clearly the inclusion of coupled waves, nuclear polarizability, and Coulomb effects. They can be obviously included in the present formalism.

## ACKNOWLEDGMENTS

Our involvement with this problem started when M. Harvey kindly explained to one of us his ideas and first results on the fission structure which preexists in nuclei. We are deeply grateful to him for providing us with such a stimulating material prior to publication. Also the influence of D. M. Brink was decisive for this work, through many encouraging and stimulating discussions and private communications, and we are grateful to him. It is a pleasure to acknowledge gratifying discussions with D. Bunakov, M. Demeur, G. Ripka, A. Winter, J. M. Hansteen, N. Austern, P. Bonche, S. Das Gupta, D. Zaikin, F. Tabakin, W. Nörenberg, W. Von Oertzen, V. G. Neudachin, and P. U. Sauer.

---

*Partial fulfillment of the Ph.D. thesis of A.L. at the University of Paris, 11 (Orsay).

[1]D. L. Hill and J. A. Wheeler, Phys. Rev. **89**, 1102 (1953); J. J. Griffin and J. A. Wheeler, Phys. Rev. **108**, 311 (1957).

[2]R. E. Peierls and J. Yoccoz, Proc. Phys. Soc. Lond. **A70**, 381 (1957).

[3]B. Giraud and P. U. Sauer, Phys. Lett. **30B**, 218 (1969).

[4]H. Margenau, Phys. Rev. **59**, 37 (1941); C. Bloch, private communication; D. M. Brink, in *Many-body Description of Nuclear Structure and Reactions, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi," Course 36*, edited by C. Bloch (Academic, New York, 1966); D. M. Brink, H. Friedrich, A. Weiguny, and C. W. Wong, Phys. Lett. **33B**, 143 (1970); S. K. M. Wong, private communication.

[5]B. Jancovici and D. Schiff, Nucl. Phys. **58**, 678 (1964).

[6]D. M. Brink and A. Weiguny, Nucl. Phys. **A120**, 59 (1968).

[7]C. W. Wong, Nucl. Phys. **A147**, 545 (1970).

[8]D. M. Brink, lectures at Orsay, 1969 (unpublished).

[9]H. Horiuchi, Prog. Theor. Phys. **43**, 375 (1970).

[10]B. Giraud, J. C. Hocquenghem, and A. Lumbroso, Proceedings of the La Toussuire Meeting, 1971 (unpublished), lecture C6.

[11]F. Tabakin, Nucl. Phys. **A182**, 497 (1972).

[12]N. de Takacsy, Phys. Rev. C **5**, 1883 (1972).

[13]T. Fliessbach, Nucl. Phys. A (to be published).

[14]D. M. Brink, private communication.

[15]D. Zaikin, Nucl. Phys. **A170**, 584 (1971).

[16]C. W. Wong, Nucl. Phys. A (to be published).

[17]T. Yukawa, Phys. Lett. **38B**, 1 (1972).

[18]K. Pruess and W. Greiner, Phys. Lett. **33B**, 197 (1970).

[19]B. Giraud, J. Le Tourneux, and S. K. M. Wong, Phys. Lett. **32B**, 23 (1970).

[20]P. Federman, B. Giraud, and D. Zaikin, Nucl. Phys. **A102**, 81 (1967).

[21]J. A. Wheeler Phys. Rev. **52**, 1083 (1937); K. Wildermuth and Th. Kanellopoulos, CERN Report No. 59-23 (unpublished), p. 6934; K. Wildermuth and N. Mc Clure, *Cluster*

*Representation of Nuclei* (Springer-Verlag, Berlin, 1966); V. G. Neudachin and Yu. F. Smirnov, *Clusters in Light Nuclei* (Science Edition, Moscow, 1969).

[22]P. O. Löwdin, Phys. Rev. **97**, 1474 (1955).
[23]D. M. Brink and F. Boeker, Nucl. Phys. **A91**, 1 (1967).
[24]S. Saito, Prog. Theor. Phys. **41**, 705 (1969).

APPENDICE D

C6-1.

# COORDONNEES GENERATRICES DANS LES ETATS DU CONTINU

B. GIRAUD, J.C. HOCQUENGHEM, A. LUMBROSO

Service de Physique Théorique
Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay
BP n° 2 - 91, Gif-sur-Yvette
FRANCE

---

## I - INTRODUCTION

La méthode des coordonnées génératrices, inventée par Griffin, Hill et Wheeler [1] a surtout servi à l'étude des rotations nucléaires avec [2] et sans [3] symétrie axiale, ainsi qu'à l'étude des formes et mouvements collectifs nucléaires dans le cadre du modèle des agrégats pour les noyaux légers [4]. L'intérêt porté aux coordonnées génératrices a été renouvelé par les travaux récents de Brink et Weiguny [5] et de C.W. Wong [6], qui montrent combien leur domaine d'application est étendu. Cependant, à notre connaissance [7], l'étude des réactions nucléaires n'a pas encore été abordée systématiquement avec cette méthode. La présente communication a pour but de montrer que le formalisme de la coordonnée génératrice permet un traitement rigoureusement microscopique des collisions nucléaires. Notre espoir est de pouvoir un jour étudier ainsi le phénomène de la fission et la collision de noyaux lourds. Mais ce but est encore très lointain, à cause de grandes difficultés de calcul [8]. Nous nous contenterons de donner ici un exemple exactement soluble et une application numérique, qui concernent la collision élastique de 2 noyaux très légers. Nous démontrerons aussi que notre théorie est formellement équivalente au formalisme du groupe résonnant pour les agrégats, qui a donné lieu à d'importants développements par de nombreux auteurs [9] depuis longtemps, et préciserons les différences de détail apportées par notre théorie. Un exposé sera fait indépendamment par D. Zaikin, qui généralisera nos cas particuliers et résoudra le difficile problème posé par l'influence du principe de Pauli sur la collision.

## II - UN CAS PARTICULIER SOLUBLE ANALYTIQUEMENT

Afin d'introduire notre formalisme, nous considérons le cas d'une collision entre deux dineutrons. Ce modèle est bien entendu entièrement fictif, mais il a l'avantage de présenter de façon simple et analytique chacune des étapes du formalisme.

### II.a - Base $\{\Phi_{\underline{r}}\}$

On se donne une origine absolue E arbitraire et on considère un oscillateur harmonique centré au point de vecteur coordonnée $\frac{\underline{r}}{2}$. Les paramètres de cet oscillateur sont la masse m d'un nucléon et la fréquence $\omega$, ou la longueur $b = (\hbar/m\omega)^{1/2}$. Pour les besoins du modèle, les neutrons du premier dineutron sont mis dans les deux orbites os, à spins antiparallèles, de cet oscillateur. Le premier dineutron (P) a pour fonction d'onde

$$\Psi^P(\tfrac{\underline{r}}{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathcal{A}_{12}\Big[\pi^{-3/2}\, b^{-3}\, \exp - \frac{(\underline{r}_1-\underline{r}/2)^2+(\underline{r}_2-\underline{r}/2)^2}{2b^2}\; \chi_1^+\; \chi_2^-\Big] \qquad (1)$$

où on reconnait les coordonnées d'espace $\underline{r}_1$, $\underline{r}_2$ et de spin $\chi_1$, $\chi_2$ pour les neutrons 1 et 2. L'opérateur $\mathcal{A}_{12}$ est l'antisymétriseur des nucléons 1 et 2. En seconde quantification, on

peut définir les opérateurs $p^+$ et $\bar{p}^+$ qui créent un nucléon avec les spins $\pm$ dans l'orbite os centrée autour du point $\frac{\underset{\sim}{r}}{2}$, et on obtient :

$$|\Psi^P\rangle = p^+ \bar{p}^+ |0\rangle \quad , \tag{2}$$

où le vide de nucléons est représenté par $|0\rangle$.

On considère maintenant un deuxième oscillateur harmonique identique au premier mais centré au point $-\frac{\underset{\sim}{r}}{2}$. Il sert à définir le deuxième dineutron (D) avec les nucléons 3 et 4

$$\Psi^D(-\tfrac{\underset{\sim}{r}}{2}) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{A}_{34} \left[ \pi^{-3/2}\, b^{-3} \exp - \frac{(\underset{\sim}{r}_3+\underset{\sim}{r}/2)^2+(\underset{\sim}{r}_4+\underset{\sim}{r}/2)^2}{2b^2} \quad \chi_3^+ \chi_4^- \right] . \tag{3}$$

En définissant les opérateurs de création $d^+$ et $\bar{d}^+$ dans l'orbite os centrée autour de $\frac{-\underset{\sim}{r}}{2}$, on obtient

$$|\Psi^D\rangle = d^+ \bar{d}^+ |0\rangle \quad . \tag{4}$$

Pour représenter la situation où les dineutrons sont à une distance $\underset{\sim}{r}$ l'un de l'autre, on commence par considérer le produit $\Psi^D \Psi^P$, sans antisymétrisation entre les dineutrons. Il est alors utile de définir $\underset{\sim}{\xi}_P \equiv \underset{\sim}{r}_1 - \underset{\sim}{r}_2$ et $\underset{\sim}{\xi}_D \equiv \underset{\sim}{r}_3 - \underset{\sim}{r}_4$, puis $\underset{\sim}{R}_P \equiv \frac{\underset{\sim}{r}_1+\underset{\sim}{r}_2}{2}$ et $\underset{\sim}{R}_D = \frac{\underset{\sim}{r}_3+\underset{\sim}{r}_4}{2}$, enfin $\underset{\sim}{\rho} \equiv \underset{\sim}{R}_P - \underset{\sim}{R}_D$ et $\underset{\sim}{R} = \frac{\underset{\sim}{R}_P+\underset{\sim}{R}_D}{2}$, qui sont évidemment, dans l'ordre, les coordonnées internes puis les coordonnées de centre de masse des dineutrons, enfin la coordonnée dynamique relative entre les dineutrons et la position du centre de masse total. En fonction de ces coordonnées, on trouve

$$\Psi^D \Psi^P = \pi^{-3}\, b^{-6} \exp -\left(\frac{2R^2}{b^2} + \frac{(\underset{\sim}{\rho}-\underset{\sim}{r})^2}{2b^2} + \frac{\xi_P^2+\xi_D^2}{4b^2}\right) \frac{1}{2} \mathcal{A}_{12}\, \chi_1^+ \chi_2^- \mathcal{A}_{34}\, \chi_3^+ \chi_4^- \quad . \tag{5}$$

On remarque d'une part que le mouvement du centre de masse se factorise et ne dépend pas de $\underset{\sim}{r}$, d'autre part que $\langle \underset{\sim}{\rho} \rangle = \underset{\sim}{r}$. On reconnait ici que $\underset{\sim}{r}$ peut jouer le rôle d'une coordonnée génératrice, sachant que la vraie variable dynamique $\underset{\sim}{\rho}$ (distance entre les centres de masse des dineutrons) qui nous intéresse dans la collision fluctue autour de $\underset{\sim}{r}$ avec un écart quadratique de l'ordre de $b$.

Il reste à antisymétriser entre les dineutrons, ce qui définit

$$|\Phi_{\underset{\sim}{r}}\rangle \equiv d^+ \bar{d}^+ p^+ \bar{p}^+ |0\rangle \quad . \tag{6}$$

Comme le centre de masse total est symétrique par rapport aux échanges de particules, on voit que $\Phi_{\underset{\sim}{r}}$ contient, quel que soit $\underset{\sim}{r}$, un mouvement de centre de masse fixe, factorisé en un paquet d'ondesgaussien autour de E. D'autre part, si la distance $r \equiv |\underset{\sim}{r}|$ est sensiblement supérieure au rayon de la région d'interaction ($\approx$ 2 ou 3b), alors la coordonnée relative $\underset{\sim}{\rho}$ n'est pas perturbée par le principe de Pauli qui entraine des mélanges entre $\underset{\sim}{\rho}$, $\underset{\sim}{\xi}_P$ et $\underset{\sim}{\xi}_D$. On a encore $\langle \underset{\sim}{\rho} \rangle = \underset{\sim}{r}$, et $\Phi_{\underset{\sim}{r}}$ représente bien les dineutrons "statiques" qui oscillent légèrement l'un par rapport à l'autre à la distance relative moyenne $\underset{\sim}{r}$. Au contraire, si $r \lesssim 2$ ou 3b, les effets d'échange deviennent très importants et la coordonnée $\underset{\sim}{\rho}$ n'a plus de sens physique précis. A la limite où $r \to 0$, on voit que $\Phi_{\underset{\sim}{r}} \to 0$ et il est bien connu [4] que la composante de $\Phi_{\underset{\sim}{r}}$ qui s'annule à l'ordre le plus bas en $r$ correspond au modèle en couches

de l'oscillateur harmonique centré à l'origine E. Dans le cas présent, deux nucléons de même spin qui étaient dans les orbites os centrées en $\pm \frac{\underset{\sim}{E}}{2}$ doivent se redistribuer en une orbite os et une orbite op centrée autour de E. On peut qualifier cet effet de "réarrangement ou polarisation géométrique" dû au principe de Pauli.

L'ensemble des kets $\Phi_{\underset{\sim}{r}}$ , quand le vecteur $\underset{\sim}{r}$ prend toutes les valeurs possibles, sous-tend l'espace vectoriel qui nous servira à engendrer la fonction d'onde de collision

$$|\Psi\rangle = \int d\underset{\sim}{r}\ f(\underset{\sim}{r})\ |\Phi_{\underset{\sim}{r}}\rangle \quad . \tag{7}$$

L'amplitude $f(\underset{\sim}{r})$ est une amplitude de mélange de configurations sur une base à indice continu $\underset{\sim}{r}$ . C'est l'inconnue de notre problème et elle doit nous donner les déphasages de la collision.

II.b - Relation avec le formalisme du groupe résonnant

En portant l'équation (5) antisymmétrisée(éq.(6)) dans l'équation (7) on trouve

$$\Psi = \left[\pi^{-3/4}\left(\frac{b}{2}\right)^{-3/2} \exp - \frac{2R^2}{b^2}\right] \quad (4!)^{-\frac{1}{2}}\mathcal{A}_{1234} \quad g(\underset{\sim}{\rho})\ \Psi^D_{int}\ \Psi^P_{int} \ , \tag{8}$$

où on reconnait la fonction d'onde interne du premier dineutron

$$\Psi^P_{int} = \pi^{-3/4}\ (b\sqrt{2})^{-3/2} \quad (2!)^{-\frac{1}{2}}\mathcal{A}_{12} \quad \exp - \frac{\xi_P^2}{4b^2}\ \chi_1^+\ \chi_2^- \ , \tag{9}$$

la fonction d'onde interne du deuxième dineutron

$$\Psi^D_{int} = \pi^{-3/4}\ (b\sqrt{2})^{-3/2} \quad (2!)^{-\frac{1}{2}}\mathcal{A}_{34} \quad \exp - \frac{\xi_D^2}{4b^2}\ \chi_3^+\ \chi_4^- \ , \tag{10}$$

et la fonction d'onde relative

$$g(\underset{\sim}{\rho}) = \int d\underset{\sim}{r} \quad \Gamma(\underset{\sim}{\rho},\underset{\sim}{r})\ f(\underset{\sim}{r}) \ , \tag{11}$$

avec $$\Gamma(\underset{\sim}{\rho},\underset{\sim}{r}) = \pi^{-3/4}\ b^{-3/2}\ \exp - \frac{(\underset{\sim}{\rho}-\underset{\sim}{r})^2}{2b^2} \quad . \tag{12}$$

Il est clair d'après l'équation (8) que, si on omet la fonction d'onde du centre de masse (entre crochets) qui ne joue aucun rôle puisqu'elle est factorisée, la fonction de collision $\Psi$ est identique à celle qu'on utilise dans le formalisme du groupe résonnant [9] où l'inconnue est $g(\underset{\sim}{\rho})$. La relation entre les formalismes de la coordonnée génératrice et du groupe résonnant peut se résumer par la transformation

$$g = \Gamma\ f \quad , \tag{13}$$

où $\Gamma$ est l'opérateur linéaire intégral défini par l'équation (12).

II.c - Equation de Hill et Wheeler

On se donne le hamiltonien $\mathcal{H}$ formé par l'énergie cinétique des nucléons et un potentiel à deux corps, force centrale Gaussienne

$$V_{ij} = U_o \exp - \frac{(\underset{\sim}{r}_i - \underset{\sim}{r}_j)^2}{\mu^2} (A+B\,P_\sigma+CP_\tau+DP_\sigma P_\tau) \quad , \tag{14}$$

où $U_o$ est une profondeur, $\mu$ est une portée, $P_\sigma$ et $P_\tau$ sont les opérateurs d'échange de spin et isospin, et A,B,C,D sont les coefficients de mélange correspondants. Dans le sous-espace défini par la base $|\Phi_{\underset{\sim}{r}'}|$ , l'équation que doit vérifier $\Psi$ s'écrit

$$\langle \Phi_{\underset{\sim}{r}'} | \mathcal{H}-E|\Psi\rangle = 0 \qquad \forall_{\underset{\sim}{r}'} \quad , \tag{15}$$

et devient, compte tenu de l'équation (7), l'équation intégrale de Hill et Wheeler pour l'inconnue $f(\underset{\sim}{r})$

$$\int d\underset{\sim}{r} \left[H(\underset{\sim}{r}';\underset{\sim}{r}) - E\,N(\underset{\sim}{r}';\underset{\sim}{r})\right] f(\underset{\sim}{r}) = 0 \quad , \tag{16}$$

avec $H(\underset{\sim}{r}';\underset{\sim}{r}) \equiv \langle \Phi_{\underset{\sim}{r}'} | \mathcal{H} | \Phi_{\underset{\sim}{r}} \rangle$ , (17)

et $N(\underset{\sim}{r}';\underset{\sim}{r}) \equiv \langle \Phi_{\underset{\sim}{r}'} | \Phi_{\underset{\sim}{r}} \rangle$ . (18)

Le calcul des noyaux intégraux N et H est relativement long et encombrant, mais il se fait sans difficulté car l'équation (6) permet d'appliquer les techniques de la seconde quantification. Il est donc permis d'espérer que le même calcul peut se faire pour des nombres de nucléons qui ne sont pas petits, au prix seulement d'un nombre de termes beaucoup plus grand. Dans le cas présent, on trouve aisément

$$N(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}') = \left[\exp - \frac{(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2} - \exp - \frac{(\underset{\sim}{r}+\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2}\right]^2 . \tag{19}$$

Pour le noyau du hamiltonien, il faut remarquer que c'est l'énergie <u>relative</u> des fragments qui présente un intérêt. Il faut donc soustraire de l'énergie totale du système
a) l'énergie interne de chaque dineutron c'est-à-dire $T^i = \frac{3}{4}\hbar\omega$ pour l'énergie cinétique et, ainsi que le montre un calcul trivial, $V^i = 2U_o(A-B+C-D)(1+2b^2/\mu^2)^{-3/2}$, pour l'énergie potentielle;
b) l'énergie cinétique du centre de masse total $T^{c.m.} = \frac{3}{4}\hbar\omega$ .
Afin que la valeur propre E dans l'équation (16) représente bien l'énergie relative des dineutrons, on fixe donc le zéro des énergies en soustrayant du noyau $H(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}')$ la quantité $(2T^i+2V^i+T^{c.m.})N(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}')$. Le calcul (en seconde quantification) de ce nouveau noyau $H'(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}')$ donne la contribution d'énergie cinétique

$$T(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}') = \hbar\omega \left(\exp - \frac{(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2} - \exp - \frac{(\underset{\sim}{r}+\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2}\right)\left\{\left[\frac{3}{4} - \frac{(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2}\right]\exp - \frac{(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2} - \left[\frac{3}{4} - \frac{(\underset{\sim}{r}+\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2}\right]\right.$$

$$\left. \exp - \frac{(\underset{\sim}{r}+\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2}\right\} , \tag{20}$$

et la contribution d'énergie potentielle

$$V(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{r}') = 2U_o(1+2b^2/\mu^2)^{-3/2}$$

$$\left[\begin{array}{l} 2(A-B+C-D)\ \exp-\frac{\underset{\sim}{r}^2+\underset{\sim}{r}'^2}{4b^2}\left(1-\exp-\frac{\underset{\sim}{r}^2}{8b^2+4\mu^2}-\exp-\frac{\underset{\sim}{r}'^2}{8b^2+4\mu^2}\right) \\ +(2A+B+2C+D)\left(\exp-\frac{(\underset{\sim}{r}+\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}\exp-\frac{(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}')^2}{4b^2}+\exp-\frac{(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}\exp-\frac{(\underset{\sim}{r}+\underset{\sim}{r}')^2}{4b^2}\right) \\ -(A+2B+C+2D)\ \exp-\frac{\underset{\sim}{r}^2+\underset{\sim}{r}'^2}{4b^2}\left(\exp-\frac{(\underset{\sim}{r}+\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}+\exp-\frac{(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}')^2}{8b^2+4\mu^2}\right) \end{array}\right] . \qquad (21)$$

II.d - Transformation de l'équation de Hill et Wheeler

On pourrait penser a priori que l'équation (16) peut être résolue par discrétisation avec un ensemble de points d'intégration bien choisis. Mais cette discrétisation a pour premier désavantage de quantifier l'énergie E alors qu'on voudrait pouvoir faire le calcul pour toute valeur du spectre continu. Une seconde difficulté, plus fondamentale, apparait si on tente néanmoins cette procédure numérique : les valeurs $f(\underset{\sim}{r}_i)$ obtenues aux points d'intégration n'engendrent pas une fonction $f(\underset{\sim}{r})$ de façon stable quand le réseau d'intégration change. On constate que plus les points $\underset{\sim}{r}_i$ sont serrés, plus les valeurs $f(\underset{\sim}{r}_i)$ oscillent violemment. Ce phénomène d'oscillation violente peut se comprendre si on remarque qu'en transformée de Fourier l'opérateur $\Gamma$ , défini par l'équation (12), devient

$$\hat{\Gamma}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = \pi^{-3/4}\, b^{3/2} \exp-\frac{b^2q^2}{2}\ \delta(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}') , \qquad (22)$$

d'où on tire, en appellant $\hat{f}$ et $\hat{g}$ les transformées de Fourier de $f$ et $g$ ,

$$\hat{f}(\underset{\sim}{q}) = \pi^{3/4}\, b^{-3/2} \exp\frac{b^2q^2}{2}\ \hat{g}(\underset{\sim}{q}) . \qquad (23)$$

Or il est bien connu que, puisque $g(\underset{\sim}{\rho})$ est une fonction de diffusion, une forme générale de $\hat{g}(\underset{\sim}{q})$ est [10]

$$\hat{g}(\underset{\sim}{q}) = \delta(\underset{\sim}{q}_o-\underset{\sim}{q}) + \frac{\varphi(\underset{\sim}{q}_o,\underset{\sim}{q})}{q_o^2-q^2+i\varepsilon} , \qquad (24)$$

où $\underset{\sim}{q}_o$ est l'impulsion de l'onde de diffusion dans la région $r\to\infty$, et $\varphi(\underset{\sim}{q}_o,\underset{\sim}{q})$ désigne la matrice de réaction "à moitié sur la couche en énergie" [10]. En portant (24) dans (23) on voit que le facteur $\exp\frac{b^2q^2}{2}$ entraine une croissance exponentielle de $\hat{f}(q)$ quand $q \equiv |\underset{\sim}{q}| \to \infty$. Par conséquent la transformation de Fourier pour passer de $\hat{f}(\underset{\sim}{q})$ à $f(\underset{\sim}{r})$ diverge à haute fréquence. Numériquement, $f(\underset{\sim}{r})$ semble osciller violemment. En fait si $f(\underset{\sim}{r})$ peut bien être défini mathématiquement [11], ce n'est ni une fonction ni une distribution tempérée.

Afin d'obtenir les déphasages de la collision il semble donc raisonnable de calculer $g(\underset{\sim}{\rho})$ plutôt que $f(\underset{\sim}{r})$. L'équation de Hill et Wheeler, qui s'écrit en notation matricielle pour les noyaux T, V, N

$$(T+V-EN)\ f = 0 \qquad (25)$$

se transforme, compte tenu de (13), en

$$\Gamma^{-1}(T+V-EN)\Gamma^{-1}\ g = 0 , \qquad (26)$$

où $\Gamma^{-1}$ est l'inverse du noyau $\Gamma$. Comme on vient de voir que cette inversion, qui implique la transformation de Fourier de $\exp \frac{b^2 q^2}{2}$, est singulière dans la représentation des coordonnées $(\underset{\sim}{r},\underset{\sim}{\rho})$, le passage de (25) à (26) doit se faire dans la représentation des moments $(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')$. Les transformées de Fourier de N, T, V sont, respectivement,

$$\hat{N}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = (4\pi)^{3/2}\, b^3 \exp - b^2 q^2 \left[\delta(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')+ \delta(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')\right] - 16\, b^6 \exp -b^2(q^2+q'^2)\ , \tag{27}$$

$$\hat{T}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = \hbar\omega \left\{(4\pi)^{3/2}\, b^3\, \frac{b^2 q^2}{2} \exp - b^2 q^2 \left[\delta(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')+ \delta(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')\right] - 8b^6 \left[b^2(q^2+q'^2)-\frac{3}{2}\right] \exp -b^2(q^2+q'^2)\right\}, \tag{28}$$

$$\hat{V}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = 2U_o(1+2b^2/\mu^2)^{-3/2}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 2(A-B+C-D)(b\sqrt{2})^6\left[\exp -b^2(q^2+q'^2)-(\beta b\sqrt{2})^3\left(\exp -\frac{\beta^2 q^2}{2}\ \exp -b^2 q'^2+\exp -b^2 q^2\ \exp -\frac{\beta^2 q'^2}{2}\right)\right] \\ +(2A+B+2C+D)(\alpha b)^3\left[\exp -\frac{(2b^2+\mu^2)(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')^2+b^2(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')^2}{4} + \exp -\frac{b^2(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')^2+(2b^2+\mu^2)(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')^2}{4}\right] \\ -(A+2B+C+2D)(\gamma b\sqrt{2})^3\left[\exp -\frac{b^2\alpha^2(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')^2/(4b^2+\mu^2)+b^2(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')^2}{2} + \exp -\frac{b^2\alpha^2(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')^2/(4b^2+\mu^2)+b^2(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')^2}{2}\right], \end{array} \right. \tag{29}$$

avec $\alpha^2 = 2b^2+\mu^2$, $\frac{1}{\beta^2} = \frac{1}{2\alpha^2} + \frac{1}{2b^2}$, $\frac{1}{\gamma^2} = \frac{1}{\alpha^2} + \frac{1}{2b^2}$ . (30)

On voit immédiatement que $\hat{N}$, $\hat{T}$ et $\hat{V}$ décroissent assez vite, quand q et $q' \to \infty$, pour que les noyaux $n \equiv \Gamma^{-1} N \Gamma^{-1}$, $t \equiv \Gamma^{-1} T \Gamma^{-1}$ et $v = \Gamma^{-1} V \Gamma^{-1}$ ne divergent pas. On trouve en particulier

$$\hat{n}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = 2(2\pi)^3 \left[\frac{\delta(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')+\delta(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')}{2} - \pi^{-3/4}\, b^{3/2} \exp -\frac{b^2 q^2}{2} \exp -\frac{b^2 q'^2}{2}\ b^{3/2}\, \pi^{-3/4}\right] , \tag{31}$$

$$\hat{t}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = 2(2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{2m} \left[q^2\, \frac{\delta(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')+\delta(\underset{\sim}{q}+\underset{\sim}{q}')}{2} - \pi^{-3/4}\, b^{3/2} \exp -\frac{b^2 q^2}{2} \left(q^2+q'^2-\frac{3}{2b^2}\right) \exp -\frac{b^2 q'^2}{2}\cdot b^{3/2}\, \pi^{-3/4}\right] . \tag{32}$$

On remarque maintenant que l'action de n et t (c'est vrai aussi pour v) sur toute onde impaire $g_-$ donne un résultat identiquement nul. Autrement dit, l'expression $(t+v-En)\, g_-$ est identiquement nulle quels que soient E et $g_-$. On retrouve bien ainsi que les dineutrons se comportent comme des bosons. Dans ce qui suit, on n'envisage l'équation (26) que pour des ondes g de parité positive et on divise n,t,v par un facteur commun $2(2\pi)^3$ (sans signification). Le noyau n devient

$$\hat{n}_+(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = \delta(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}') - \hat{\mathcal{P}}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') \tag{33}$$

avec $\hat{\mathcal{P}}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = \pi^{-3/4}\, b^{3/2} \exp -\frac{b^2 q^2}{2} \exp -\frac{b^2 q'^2}{2}\ b^{3/2}\, \pi^{-3/4}$ . (34)

L'indice + de $n_+$ signifie qu'il y a eu projection sur les ondes paires $g_+$ du mouvement relatif des dineutrons. On reconnait d'autre part que $\hat{\mathcal{P}}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')$ représente le projecteur $\mathcal{P} \equiv |os\rangle\langle os|$ sur l'onde os du mouvement relatif. En termes d'opérateurs, l'équation (33) s'écrit

$$n_+ = 1 - \mathcal{P} \ ,$$

et on voit que $n_+$ est un projecteur. Il est facile de vérifier, par le passage des variables $\underset{\sim}{\xi}_P, \underset{\sim}{\xi}_D, \underset{\sim}{\rho}$ , $\underset{\sim}{R}$ aux variables $\underset{\sim}{r}_1$, $\underset{\sim}{r}_2$, $\underset{\sim}{r}_3$, $\underset{\sim}{r}_4$, que le principe de Pauli exclut non seulement les ondes impaires $g_-$ , d'où la réduction de $n$ en $n_+$ , mais aussi l'onde os du mouvement relatif. Par conséquent l'équation (26) n'est pas une équation dans l'espace de Hilbert complet des fonctions $g$ , mais dans un sous-espace. Les états exclus de ce sous-espace sont précisément les états propres de $n$ à valeur propre nulle.

En se reportant à l'équation (32), on trouve pour l'énergie cinétique

$$t_+ = (1-\mathcal{P})\ \theta\ (1-\mathcal{P}) \quad , \tag{35}$$

où l'opérateur $\theta$ est défini par

$$\hat{\theta}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') \equiv \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\ \delta(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}') \quad . \tag{36}$$

De même à l'aide de l'équation (29), on établit le résultat

$$v_+ = (1-\mathcal{P})\ w\ (1-\mathcal{P}) \quad , \tag{37}$$

avec $\hat{w}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}') = (2\pi)^{-3}\ 2U_o\ (1+2b^2/\mu^2)^{-3/2}$

$$(2A+B+2C+D)(\alpha b)^3\ \exp-\ \frac{(b^2+\mu^2)(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')^2}{4}$$

$$-(A+2B+C+2D)(\gamma b\sqrt{2})^3\ \exp-\left\{\frac{b^2}{8b^2+4\mu^2}\left[(2b^2+\mu^2)(\underset{\sim}{q}-\underset{\sim}{q}')^2-2\mu^2\underset{\sim}{q}.\underset{\sim}{q}'\right]\right\} \quad . \tag{38}$$

Finalement, l'équation (26) a pris la forme

$$(1-\mathcal{P})\,[\theta + w - E]\ (1-\mathcal{P})\ g = 0 \quad . \tag{39}$$

La présence du projecteur $(1-\mathcal{P})$ à droite et à gauche du crochet $[\theta + w - E]$ exprime que toute composante os dans l'onde $g$ serait parasite.

Afin de connaitre les déphasages de la diffusion à toute énergie $E > 0$, il faut résoudre l'équation (39) dans la représentation des moments $(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')$. On peut lui donner la forme

$$(\theta-E)g = [\mathcal{P}\theta+\theta\mathcal{P}-\mathcal{P}\theta\mathcal{P}-(1-\mathcal{P})w(1-\mathcal{P})-E\mathcal{P}\,]g \quad , \tag{40}$$

ou encore

$$\left(q^2-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\ \hat{g}(\underset{\sim}{q}) = \frac{2m}{\hbar^2}\int d\underset{\sim}{q}'\ [\hat{W}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')-E\hat{\mathcal{P}}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')\,]\ \hat{g}(\underset{\sim}{q}') \quad . \tag{41}$$

Le second membre de (41) a été découpé en

a) un terme intégral associé au pseudo-potentiel $W$ , qui contient à la fois des contributions dues à $\theta$ et à $w$

b) un terme dépendant de l'énergie E, qui exige que $g$ soit orthogonalisé en cours et en fin de calcul à l'onde interdite os .

L'orthogonalisation exprimée par le terme b) de l'équation (41) est une contrainte bien connue dans le formalisme du groupe résonnant [9]. Cette contrainte est satisfaite automatiquement si on modifie (41) en supprimant le terme dépendant de l'énergie, ce qui donne

$$\left(q^2 - \frac{2mE}{\hbar^2}\right) \hat{g}(q) = \frac{2m}{\hbar^2} \int dq' \ \hat{W}(q,q') \ \hat{g}(q') \quad . \tag{42}$$

En effet, en écriture matricielle, l'équation (42) s'écrit

$$(1-\mathcal{P})(\theta+w)(1-\mathcal{P})g = E\ g \quad , \tag{43}$$

qui est une équation de Schrödinger dans l'espace entier au lieu du sous-espace permis par $(1-\mathcal{P})$. La comparaison entre les deux membres de (43) montre que si $E \neq 0$, la solution $g$ ne peut contenir aucune des composantes interdites par $(1-\mathcal{P})$.

L'équation (41) et l'équation (42) sont toutes deux des équations de Schrödinger, qu'il suffit maintenant de résoudre avec des conditions aux limites convenables, ce qui est un problème bien connu.

## III - UN EXEMPLE DE CALCUL PRATIQUE

La résolution de l'équation (41), ou (42), a été entreprise, à titre d'exemple, pour le mouvement relatif s de deux dineutrons ; l'équation correspondante s'obtient en projetant sur le moment angulaire $L=0$ du mouvement relatif.

### III.a - Méthode de résolution

Seuls nous intéressent les déphasages engendrés par l'équation ainsi obtenue ; nous avons donc choisi pour calculer les déphasages d'utiliser la méthode de Fredholm telle qu'elle fut développée par Schwinger [12] et Baker [13]. En effet partant d'une équation de Schrödinger qui s'écrit $(T-E)g = Vg$ , le déterminant

$$D(z) = \det\ [1-G^o(z)\ V] \quad ,$$

où $G^o(z) = (z-T)^{-1}$ est la fonction de Green de la particule libre, contient toute l'information sur la diffusion. Pour une onde partielle de $L$ donné, le déphasage est alors

$$\operatorname{tg}\ \delta_L(E) = -\ (\operatorname{Im}\ [D_L(E+i\varepsilon)]\ /\ (\operatorname{Re}\ [D_L(E+i\varepsilon)]) \quad . \tag{44}$$

L'identité entre opérateurs

$$\det A = \exp \operatorname{tr} \log A \tag{45}$$

permet d'obtenir pour $D_L(z)$ le développement :

$$D_L(z) = 1 - \int_o^\infty \frac{dE_1\ V^L_{11}}{z-E_1} + \frac{1}{2!} \int_o^\infty \int_o^\infty \frac{dE_1\ dE_2}{(z-E_1)(z-E_2)} \begin{vmatrix} V^L_{11} & V^L_{12} \\ V^L_{21} & V^L_{22} \end{vmatrix} + \ \ldots \tag{46}$$

où les $V^L_{ij}$ sont les éléments de matrice du potentiel dans la représentation d'énergie, ce qui correspond dans notre cas à $q\,[\hat{W}^o_L(q,q') + E\hat{\mathcal{P}}_L(q,q')]\,q'$ pour l'équation (41).

En effectuant, dans $\operatorname{Im}[D_L(z)]$ et $\operatorname{Re}[D_L(z)]$, les intégrales (qui sont des parties

principales) à l'aide d'une méthode de Gauss à N points $q_i$ auxquels sont associés les poids $\omega_i$ on obtient les expressions suivantes :

$$\mathrm{Im}\,[D_L(E+i\varepsilon)] = -\pi \begin{vmatrix} -V^L_{OO} & -\dfrac{2V^L_{O1}\omega_1 q_1}{q_O^2-q_1^2} & \cdots & -\dfrac{2V^L_{ON}\omega_N q_N}{q_O^2-q_N^2} \\ \vdots & & & \\ -V^L_{NO} & & \mathrm{Re}\,[D_L(E+i\varepsilon)] & \end{vmatrix} \qquad (47)$$

$$\mathrm{Re}\,[D_L(E+i\varepsilon)] = \begin{vmatrix} 1-\dfrac{2V^L_{11}\omega_1 q_1}{q_O^2-q_1^2} & \dfrac{-2V^L_{12}\omega_2 q_2}{q_O^2-q_2^2} & \cdots & \dfrac{-2V^L_{1N}\omega_N q_N}{} \\ -\dfrac{2V^L_{21}\omega_1 q_1}{q_O^2-q_1^2} & 1-\dfrac{2V^L_{22}\omega_2 q_2}{q_O^2-q_2^2} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -\dfrac{2V^L_{N1}\omega_1 q_1}{q_O^2-q_1^2} & \cdots & & 1-\dfrac{2V^L_{NN}\omega_N q_N}{q_O^2-q_N^2} \end{vmatrix} \qquad (48)$$

avec $E = \dfrac{\hbar^2}{2m} q_o^2$ .

La méthode de Freedholm a déjà été employée en particulier par R. Jost et A. Pais [14] et par W.P. Reinhardt et A. Szabo [15] pour calculer les déphasages d'une particule par un potentiel.

III.b - Test de la méthode

La méthode de quadrature choisie est une méthode de Gauss-Legendre, précédée d'un changement de variable $q = q_o \operatorname{tg} \frac{\pi}{4}(1+x)$ qui présente l'avantage de couvrir tout l'intervalle $[0, +\infty[$ en $q$ et d'éliminer le pôle $q=q_o$ dans les intégrales.

Un test effectué dans le cas de la diffusion d'une particule par un double potentiel gaussien avec une partie répulsive et une partie attractive (Fig.1) a permis de tester la méthode en comparant les résultats avec ceux obtenus en intégrant directement l'équation de Schrödinger dans l'espace des coordonnées (Tableau 1).

III.c - Résultats pour le dineutron

Les équations (41) et (42) doivent nous donner le même déphasage. Nous avons donc calculé les déphasages, avec et sans le terme $E\mathcal{P}$ et comparé les résultats (Tableau 2).

L'interaction nucléon-nucléon employée était l'interaction B 1 de Brink et Boekker [16]; l'influence de la forme exacte du potentiel a été étudiée en faisant aussi le calcul avec la force B 3 des mêmes auteurs (Fig.2). On voit que les déphasages diffèrent sensiblement

seulement pour des énergies supérieures à 20 MeV ce qui semble dû aux parties répulsives très différentes des deux forces.

La résolution a été faite jusqu'à 1000 MeV afin d'avoir une étude extensive de ce modèle formel.

## IV - CONCLUSION

Nous avons développé un formalisme permettant de résoudre l'équation de Hill et Wheeler dans le continu ; contrairement à la méthode proposée par Brink et Weiguny [5] dans laquelle ces auteurs préconisent l'emploi de coordonnées génératrices complexes, nous ne faisons appel qu'à des variables réelles. Le problème de la collision élastique de deux noyaux est ramené à un problème de diffusion d'une particule par un potentiel non local dans lequel apparait explicitement le rôle joué par le principe de Pauli. L'avantage que ce formalisme présente par rapport à celui du groupe résonnant est de permettre aisément l'emploi de la technique de la seconde quantification : nous pouvons donc avoir l'espoir d'arriver à traiter microscopiquement les problèmes de collision d'ions lourds. La première étape dans cette direction est le traitement par cette méthode de la diffusion élastique $\alpha$, $\alpha$ qui est actuellement en cours

Pour finir, il nous faut souligner les principaux inconvénients de la méthode :

- on ne tient compte que d'une seule voie dans la réaction,
- les deux noyaux intervenant dans la collision sont considérés comme incompressibles dans la limite où le paramètre b garde une valeur constante au cours de la réaction,
- les expressions des quantités $\hat{N}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')$, $\hat{T}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')$ et $\hat{V}(\underset{\sim}{q},\underset{\sim}{q}')$ deviennent assez vite compliquées lorsque l'on augmente le nombre de nucléons.

## REFERENCES


[1] - D.L. HILL and J.A. WHEELER - Phys. Rev. 89 (1953) 1102
J.J. GRIFFIN and J.A. WHEELER - Phys. Rev. 108 (1957) 311

[2] - R.E. PEIERLS and J. YOCCOZ - Proc. Phys. Soc. A 70 (1957) 381
W.H. BASSICHIS, B. GIRAUD and G. RIPKA - Phys. Rev. Lett. 15 (1965) 980

[3] - B. GIRAUD and P.U. SAUER - Phys. Lett. 30B (1969) 218

[4] - H. MARGENAU - Phys. Rev. 59 (1941) 37
C. BLOCH - Communication privée
D.M. BRINK - Proceedings of the International School of Physics, Course 36, edited by C. BLOCH, Academic Press, 1966
D.M. BRINK, H. FRIEDRICH, A. WEIGUNY and C.W. WONG - Phys. Lett. 33B (1970) 143

[5] - D.M. BRINK and A. WEIGUNY - Nucl. Phys. A120 (1968) 59

[6] - C.W. WONG - Nucl. Phys. A147 (1970) 545

[7] - H. HORIUCHI - Progress of Theoretical Physics 43 (1970) 375

[8] - B. GIRAUD, J. Le TOURNEUX, C.W. WONG - Phys. Lett. 32B (1970) 23

[9] W. LASKAR - Ann. of Phys. 17, 436, 20, 175 (1962)

K. WILDERMUTH, T.H. KANELLOPOULOS - C.E.R.N. report 59-23, 6934

K. WILDERMUTH, W. Mc CLURE - "Cluster representation of Nuclei" Springer Verlag (1966)

V.G. NEUDACHIN, Yu.F. SMIRNOV - "Agrégats de nucléons dans les noyaux légers", édition de la Science, Moscou (1969)

[10] - M. BARANGER et al - Nucl. Phys. A138 (1969) 1

[11] - R. STORA - Communication privée

[12] - J. SCHWINGER - Phys. Rev. 93 (1954) 615

[13] - M. BAKER - Ann. Phys. 4 (1958) 271

[14] - R. JOST and A. PAIS - Phys. Rev. 82 (1951) 840

[15] - W.P. REINHART and A. SZABO - Phys. Rev. 1A (1970) 1162

[16] - D.M. BRINK and F. BOEKKER - Nucl. Phys. A91 (1967) 1

Tableau 1

| E (MeV) | 0 | 1 | 2 | 4 | 7 | 10 | 20 | 30 | 40 | 70 | 100 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\delta_S$ (rad) | $\pi$ | 2,308 | 1,986 | 1,575 | 1,225 | 1,082 | 1,560 | 1,668 | 1,566 | 1,315 | 1,170 |
| $\delta_D$ (rad) | $\pi$ | 2,309 | 1,986 | 1,576 | 1,226 | 1,082 | 1,557 | 1,667 | 1,565 | 1,314 | 1,168 |

Déphasages $\ell=0$ obtenus par la résolution numérique de l'équation de Schrodinger ($\delta_S$) et par la méthode de Fredholm ($\delta_D$), avec un potentiel $V(r) = V_1 \exp - \frac{r^2}{\mu_1^2} + V_2 \exp - \frac{r^2}{\mu_2^2}$

$V_1 = -200$ MeV, $V_2 = 90$ MeV, $\mu_1 = 2$ fm, $\mu_2 = 2{,}83$ fm. La masse est celle d'un nucléon.

Tableau 2

| E | 0 | 3 | 10 | 20 | 40 | 50 | 60 | 70 | 100 | 200 | 400 | 500 | 1000 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\delta$ | $\pi$ | 2,198 | 1,471 | 0,893 | 0,280 | 0,100 | -0,038 | -0,151 | -0,402 | -0,833 | -1,016 | -0,999 | -0,788 |
| $\delta_M$ | $\pi$ | 2,200 | 1,480 | 0,915 | 0,319 | 0,139 | -0,003 | -0,121 | -0,388 | -0,833 | -1,016 | -0,999 | -0,788 |
| $\delta'_M$ | $\pi$ | 2,202 | 1,500 | 0,964 | 0,408 | 0,236 | 0,098 | -0,021 | -0,301 | -0,818 | -1,151 | -1,194 | -1,119 |

Déphasages $\ell=0$ pour les dineutrons calculés à partir de l'éq.(41)($\delta$) et de l'éq.(42)($\delta_M$). Le paramètre b vaut 1,5 fm et l'interaction nucléaire est la force B 1 de Brink et Boekker pour $\delta$ et $\delta_M$. Les déphasages $\delta'_M$ sont obtenus avec la force B 3.

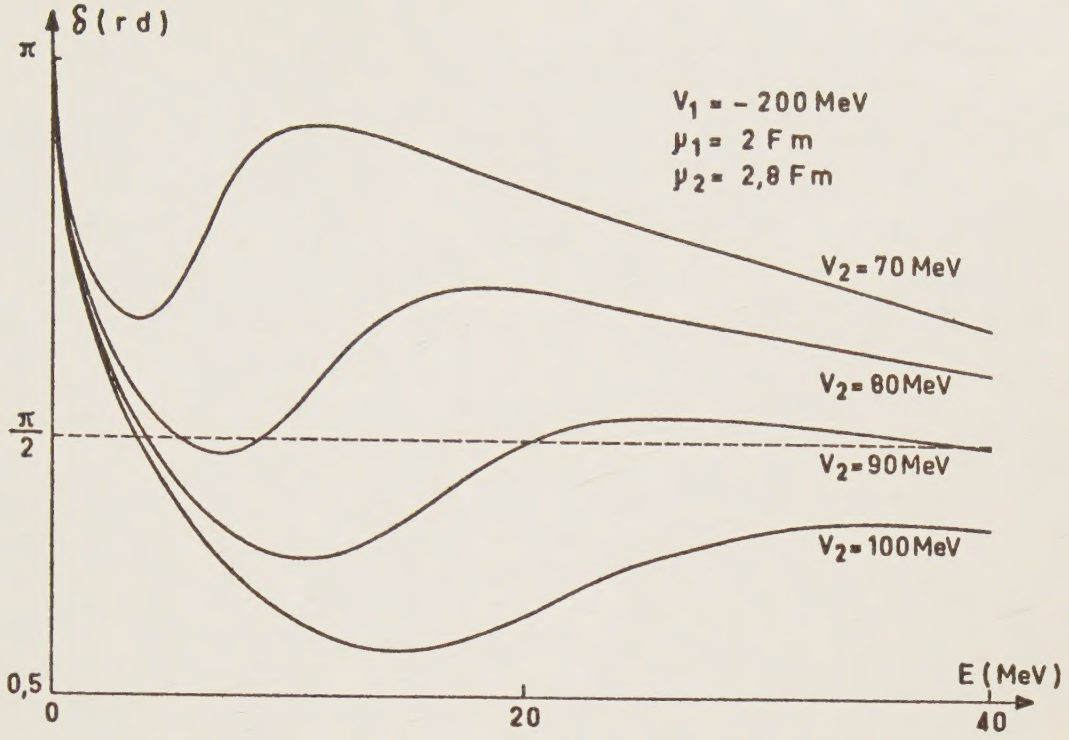



Fig.1 : Déphasages obtenus pour la diffusion d'une particule de masse la masse nucléaire avec un potentiel formé par deux gaussiennes, par la méthode de Fredholm.

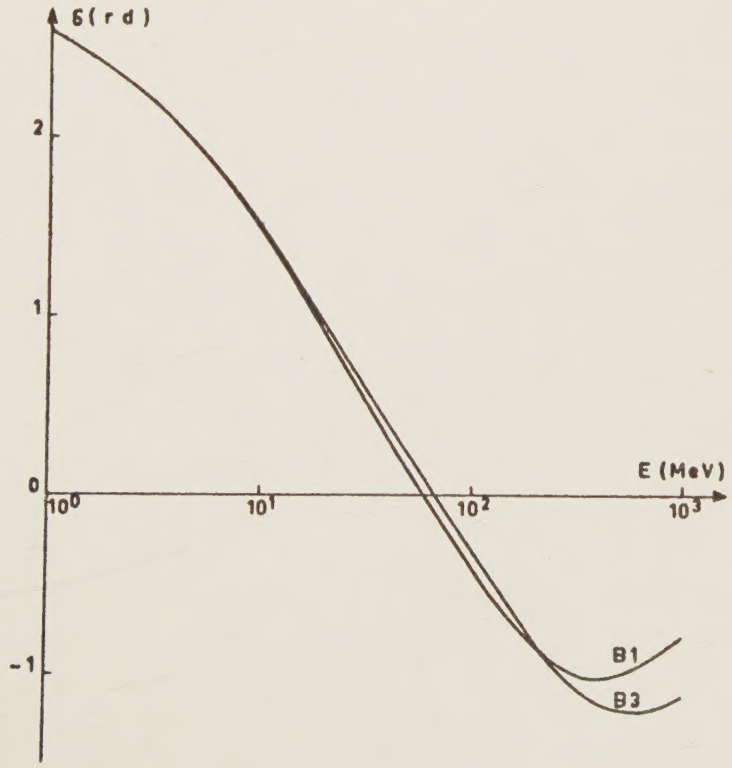



Fig.2 : Déphasages obtenus pour le dineutron avec les forces B 1 et B 3 de Brink et Boekker.